

AlN插入层对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 界面电子散射的影响

杨鹏 吕燕伍 王鑫波

Effect of inserted AlN layer on the two-dimensional electron gas in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$

Yang Peng Lü Yan-Wu Wang Xin-Bo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 197303 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.197303

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.197303>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I19>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Cu 掺杂 ZnO 稀磁半导体磁电性能影响的模拟计算

Effects of Cu doped ZnO diluted magnetic semiconductors on magnetic and electrical performance from simulation and calculation

物理学报.2015, 64(16): 167201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.167201>

Nb 高掺杂量对锐钛矿 TiO_2 导电和光学性能影响

Effects of Nb doping concentration on TiO_2 electrical conductivity and optical performance

物理学报.2015, 64(1): 017201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017201>

自旋场效应晶体管中隧道磁阻的势垒相关反转效应

Barrier-dependent tunneling magnetoresistance reversal effect in spin field effect transistors

物理学报.2014, 63(21): 217202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.217202>

In-2N 高共掺位向对 ZnO(GGA+U) 导电性能影响的研究

Study on the effect of In-2N co-doping at preferential locality on the photoelectric function of ZnO (GGA+U)

物理学报.2014, 63(13): 137201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.137201>

高氧空位浓度对金红石 TiO_2 导电性能影响的第一性原理研究

Effects of the concentration of heavily oxygen vacancy of rutile TiO_2 on electric conductivity performance from first principles study

物理学报.2013, 62(16): 167201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.167201>

AlN插入层对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 界面 电子散射的影响*

杨鹏 吕燕伍[†] 王鑫波

(北京交通大学理学院, 北京 100044)

(2015年4月19日收到; 2015年5月28日收到修改稿)

本文研究AlN作为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 插入层引起的电子输运性质的变化, 考虑了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和AlN势垒层的自发极化、压电极化对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 双异质结高电子迁移率晶体管(HEMT)中极化电荷面密度、二维电子气(2DEG)浓度的影响, 分析了AlN厚度与界面粗糙度散射和合金无序散射的关系; 结果表明, 2DEG浓度、界面粗糙度散射和合金无序散射依赖于AlN层厚度, 插入一层1—3 nm薄的AlN层, 可以明显提高电子迁移率.

关键词: 二维电子气浓度, 迁移率, 界面粗糙度散射, 合金无序散射

PACS: 73.61.Ey, 72.10.Fk, 72.20.Fr

DOI: 10.7498/aps.64.197303

1 引言

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结材料具有击穿电场高、电子饱和迁移率高、禁带宽度大等优点, 因此在高频、大功率器件领域受到了广泛关注^[1-3]. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结具有很强的自发极化和压电极化效应, 在非掺杂情况下, 界面也存在着高浓度的二维电子气(2DEG), 电子密度达 10^{13} cm^{-2} 数量级, 并且电子迁移率高达 $10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 数量级. 2DEG浓度和迁移率是氮化镓器件的重要的参数, 决定着 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 高电子迁移率晶体管的频率特性和功率特性. 科学工作者针对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT器件中限制2DEG迁移率的散射机理进行了大量的研究工作^[4-7], 也有科学工作者对外加电场情况下的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT器件的二维电子气输运做了深入研究^[8-10]. 同时研究人员提出了新的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 器件结构来获得更加优异的性能, 例如, 段宝兴等提出了一种新型阶梯HEMT结构通过优化 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT器件的表面

电场分布, 使器件击穿电压从传统结构的446 V, 提高到新结构的640 V^[11]; 朱彦旭等研制出一种具有部分纵向接触的电极的GaN HEMT器件结构, 获得了更高的跨导和饱和电流^[12]; Yan等研究了 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 双异质结构, 并发现这种结构在制造增强型高电子迁移率晶体管具有很大的潜力^[13].

实验研究表明 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和GaN中间生长一层很薄的AlN层可以明显提高2DEG迁移率^[14-16], 并且2DEG浓度略有增加. Makoto Miyoshi等详细地分析了他们的实验结果, 认为加入AlN层可以减少合金无序散射, 从而提高2DEG迁移率^[17]. 然而, 插入AlN层对于2DEG浓度略有增加, 从理论上并没有得到合理解释. Zhao, Yu等认为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 双异质结结构中AlN层的插入并不能改变极化电荷面密度和2DEG浓度^[18,19]. 在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 之间引入薄的AlN层, 增大势垒高度, 减小2DEG中的电子穿透到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中的概率, 有效地降低了2DEG所受到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层的合金无序散射, 从而大幅提高2DEG迁移率.

* 国家自然科学基金(批准号: 60976070)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: ywlu@bjtu.edu.cn

以前的研究工作主要针对插入AlN层, 提高异质结电子迁移率^[14,15,17], 并没有考虑AlN插入层厚度和Al组分的变化对电子迁移率的影响. 实际上, AlN厚度的变化会影响到2DEG浓度, 而界面粗糙度散射和合金无序散射又是依赖于2DEG浓度的. 本文以 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 双异质结结构中的2DEG为研究对象, 考虑有限厚度势垒层, 并且计入各层的自发极化效应和压电极化效应, 得到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 双异质结构中二维电子气的特性, 讨论在不同的Al组分下, 二维电子气浓度、面密度, 以及界面粗糙度散射和合金无序散射与AlN插入层厚度的关系. 这个研究对于控制这类器件结构的2DEG浓度和提高电子迁移率有重要意义.

2 理论模型和方法

2.1 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT结构中的2DEG浓度

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 异质结结构图如图1所示. 由于GaN层厚度一般都在上百纳米, 而AlN层和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层的厚度相比于GaN层而言很薄, 所以一般认为GaN层处于松弛状态, AlN层和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层处于拉伸状态, GaN层中只有自发极化 P_{sp} , AlN层和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层中除去自发极化 P_{sp} , 还存在压电极化 P_{E} ^[17,20]. 相比于2DEG浓度, GaN层的背景载流子浓度很小, 可忽略不计. 在AlN/GaN界面和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 界面, 极化电荷面密度 $\sigma_{\text{AlN}/\text{GaN}}$ 和 $\sigma_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}}$ 可以表示为^[21]

$$|\sigma_{\text{AlN}/\text{GaN}}| = |P_{\text{E}}(\text{AlN}) + P_{\text{sp}}(\text{AlN}) - P_{\text{sp}}(\text{GaN})|, \quad (1)$$

$$|\sigma_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}}| = |P_{\text{E}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) + P_{\text{sp}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) - P_{\text{sp}}(\text{GaN})|. \quad (2)$$

按照文献^[18]和^[19]中的计算方法, 计算结果采用考虑双层压电极化和自发极化, 两者之和把AlN层的自发极化和压电极化相消, 这样处理不尽合理, 会得出AlN对于极化完全没有贡献这个结论. 而实际上, AlN的自发极化和压电极化效应都比 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 要强, 所以AlN层的插入会增强极化作用, 但是由于AlN层上下界面电荷的屏蔽作

用, 极化作用引起的电荷分布并不能显著地增大2DEG的浓度.

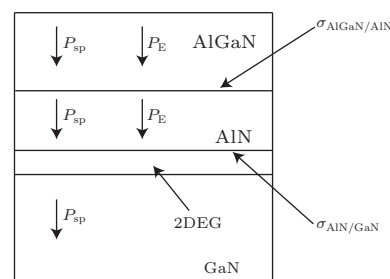


图1 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 异质结结构
Fig. 1. The structure of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ heterojunction.

AlN层、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层的压电极化强度 $P_{\text{E}}(\text{AlN})$ 和 $P_{\text{E}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})$ 的表达式可用下式表示^[21]:

$$P_{\text{E}}(\text{AlN}) = 2 \frac{a_{\text{GaN}} - a_{\text{AlN}}}{a_{\text{AlN}}} \left[e_{13}(\text{AlN}) - e_{33}(\text{AlN}) \frac{C_{13}(\text{AlN})}{C_{33}(\text{AlN})} \right], \quad (3)$$

和

$$P_{\text{E}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 2 \frac{a_{\text{GaN}} - a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}}{a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}} \left[e_{13}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) - e_{33}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) \frac{C_{13}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})}{C_{33}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})} \right], \quad (4)$$

其中 x 是Al的摩尔组分, 表1列出计算中使用的参数, 包括AlN和GaN材料的晶格常数、压电常数、弹性常数和自发极化强度. 计算所用的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒层参数为AlN和GaN二者参数的线性组合^[22]. 在(4)式中, 计算 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中的压电极化强度, 考虑到AlN层非常薄, GaN层的厚度远远大于AlN层的厚度, 为与GaN晶格匹配, 可以认为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 晶格处于被拉伸状态.

表1 GaN, AlN和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的各项参数
Table 1. Parameters of GaN, AlN and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

参数	GaN	AlN	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$
a/nm	0.3189	0.3112	
C_{13}/GPa	103	108	
C_{33}/GPa	405	373	
$e_{31}/(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.49	-0.6	$xP_{\text{AlN}} + (1-x)P_{\text{GaN}}$
$e_{33}/(\text{C}/\text{m}^2)$	0.73	1.46	
$P_{\text{sp}}(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.029	-0.081	

在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结器件, 尤其是氮化镓基的高频、大功率器件中, 肖特基势垒 $e\phi_B$ 一般随频率、外加电压以及温度变化, 其规律已经被 Zhang 等研究^[23,24]. 本文采用的模型, 认为肖特基势垒为常数, 与 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层的电场强度可由下式描述^[25]:

$$\begin{aligned} & (\sigma_{\text{AlGa}} - en_s)/\varepsilon_0\varepsilon_{\text{AlGa}} \\ & = (e\phi_B + E_F - \Delta E_c(x))/ed_{\text{AlGa}}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $e\phi_B$ 通常取 2.7—2.9 eV, 本文在计算中取 2.9 eV, σ_{AlGa} 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层的极化电荷面密度, n_s 是二维电子气浓度, d_{AlGa} 为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层厚度, 本文固定为 20 nm, ε_0 是真空介电常数, $\varepsilon_{\text{AlGa}}$ 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料的相对介电常数, e 单位电子所带的电荷量, $\Delta E_c(x)$ 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 材料的导带带阶, $E_F = E_0 + \pi\hbar^2 n_s/m^*$ 是费米能级^[21], 其中 $E_0 = \left[\frac{9\pi\hbar^2 e^2 n_s}{8\varepsilon_0\bar{\varepsilon}\sqrt{8m^*}} \right]^{2/3}$ 是最低的子带能级^[21], m^* 是量子阱中的电子有效质量, 本文取 $m^* = 0.2m_e$, m_e 是电子质量.

由此可知在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 材料中, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 层中的平均电场强度可类比(5)式由下式描述:

$$\frac{\bar{\sigma} - en_s}{\varepsilon_0\bar{\varepsilon}} = \frac{e\phi_B + E_F - \Delta E'_c(x)}{e(d_{\text{AlGa}} + d_{\text{AlN}})}, \quad (6)$$

其中 $\bar{\sigma} = \frac{\sigma_{\text{AlGa}}d_{\text{AlGa}} + \sigma_{\text{AlN}}d_{\text{AlN}}}{d_{\text{AlGa}} + d_{\text{AlN}}}$ 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 势垒层的平均极化面电荷密度, $\sigma_{\text{AlN}} = (\sigma_{\text{AlGa}/\text{AlN}} + \sigma_{\text{AlGa}/\text{AlN}})/2$ 是 AlN 层的极化电荷面密度, d_{AlN} 是 AlN 层的厚度, $\sigma_{\text{AlGa}} = \frac{\varepsilon_{\text{AlGa}}d_{\text{AlGa}} + \varepsilon_{\text{AlN}}d_{\text{AlN}}}{d_{\text{AlGa}} + d_{\text{AlN}}}$ 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 层的平均相对介电常数, $\Delta E'_c(x) = \Delta E_{c\text{AlN}/\text{GaN}} - \Delta E_{c\text{AlN}/\text{AlGa}} = \Delta E_c(x)$ 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 材料的导带带阶.

根据(6)式, 可以得到 2DEG 浓度的表达式:

$$\begin{aligned} n_s &= \frac{\bar{\sigma}}{e} - \left(\frac{\varepsilon_0\bar{\varepsilon}}{(d_{\text{AlGa}} + d_{\text{AlN}})e^2} \right) \\ &\quad \times [e\phi_B + E_F - \Delta E'_c(x)]. \end{aligned} \quad (7)$$

2.2 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT 中的界面粗糙度散射

界面粗糙度散射矩阵元由下式给出^[26]:

$$M_{\text{rough } k \rightarrow k'} = eF\Delta(q), \quad (8)$$

其中 $\Delta q = \int dr \Delta(r) e^{iq \cdot r}$, 粗糙度函数 $\Delta(r)$ 满足高斯自相关函数 $C(r) = \langle \Delta(r') \Delta(r' - r) \rangle \approx \Delta^2 e^{-r^2/L^2}$, Δ 为平均粗糙高度, L 为横向粗糙尺寸, 在本文中分别取 0.3 nm 和 1.5 nm, F 是界面的平均电场强度, 可由高斯定理求得 $F = \frac{en_s}{2\varepsilon_0\bar{\varepsilon}}$, q 是二维波矢, 假定散射过程是弹性散射, 则波矢可取费米波矢, 即 $|k| = |k'| = \sqrt{(2\pi n_s)}$, $q = 2k \sin(\theta/2)$, θ 是波矢 k 和 k' 的夹角.

界面粗糙度散射的弛豫时间可由费米黄金规则求得^[26]

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\tau_{\text{rough}}} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |F|^2 \sum_{k'} S(q) S_C(1 - \cos \theta) \delta(E_{k'} - E_k) \\ &= \frac{e^2 |F|^2 m^*}{2\pi\hbar^3} \int_0^{2\pi} S(q) S_C(1 - \cos \theta) d\theta, \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $S(q) = \pi\Delta^2 L^2 e^{-q^2 L^2/4}$, $S_C = [q/(q + q_{\text{TF}})]^2$ 是屏蔽因子, $q_{\text{TF}} = 2\pi/a_B$ 是托马斯-费米波矢, $a_B = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(m^*e^2)$ 是有效玻尔半径^[27], 所以界面粗糙度散射迁移率 μ_{rough} 如下:

$$\mu_{\text{rough}} = \frac{e}{m^*} \langle \tau_{\text{rough}} \rangle. \quad (10)$$

2.3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ HEMT 中的合金无序散射

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 材料中合金无序散射的弛豫时间可由下式描述^[7]:

$$\frac{1}{\tau_{\text{alloy}}} = \frac{m^*x(1-x)\Omega(U_0)^2}{\hbar^3} \int_{\text{alloy}} \phi^4(z) dz. \quad (11)$$

其中 Ω 为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 元胞体积, $U_0 = \Delta E_c$ 是合金散射势能, 其中 ΔE_c 为 AlN 和 GaN 之间的导带带阶^[28], $\phi(z)$ 是渗透进 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 部分的 2DEG 波函数, 并且

$$\begin{aligned} \phi(z)^2 &= \frac{4\pi e}{\varepsilon_0\varepsilon_{\text{AlGa}}} \left(\frac{1}{2}n_s + n_{\text{depl}} \right) \\ &\quad \times \exp \left[\left(\frac{8m^*\Delta E_c}{\hbar^2} \right)^{1/2} z \right] \quad [7], \end{aligned}$$

在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 体系中耗尽层电荷浓度 $n_{\text{depl}} \ll n_s$, 所以计算中可以忽略耗尽层电荷浓度.

在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 之间插入 AlN 层时, 假定 AlN 层厚度为 h_0 , 那么渗透进 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 部分的 2DEG 波函数可以写成

$$\varphi(z)^2 = \frac{4\pi e}{\varepsilon_0\varepsilon_{\text{AlGa}}} \left(\frac{1}{2}n_s + n_{\text{depl}} \right)$$

$$\times \exp \left[\left(\frac{8m^* \Delta E_c}{\hbar^2} \right)^{1/2} (z - h_0) \right],$$

计算时约定在 z 方向上取 AlN 和 GaN 界面为零界面, GaN 层及以上为负, AlN 层以下为正. 类似于 (10) 式, 合金无序散射迁移率 μ_{alloy} 可由下式描述:

$$\mu_{\text{alloy}} = \frac{e}{m^*} \langle \tau_{\text{alloy}} \rangle. \quad (12)$$

3 结果与分析

图2给出了 Al 摩尔组分分别为 0.2, 0.3, 0.4 时 AlN 层厚度和 2DEG 浓度的关系曲线. 从图2可以看出, AlN 插入层越厚, 2DEG 浓度越大. Al 摩尔组分为 0.2, 0.3, 0.4 时, 在没有 AlN 插入层即回到了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 的情况, 2DEG 浓度分别为 $8.86 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $1.47 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 和 $2.08 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 插入 1 nm 厚的 AlN 层之后, 2DEG 浓度分别达到了 $1.12 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, $1.66 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 和 $2.23 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 这是因为 AlN 有比 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 GaN 更强的自发极化和压电极化效应, 根据 (1), (2) 和 (7) 式, AlN 插入层厚度增加, 使 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$ 层的平均极化电荷面密度增大, 2DEG 浓度随之增大, 但是根据 (6) 式, 考虑 AlN 层上下界面电荷的屏蔽作用, AlN 层极化作用引起的电荷分布只是略微增大了 2DEG 浓度.

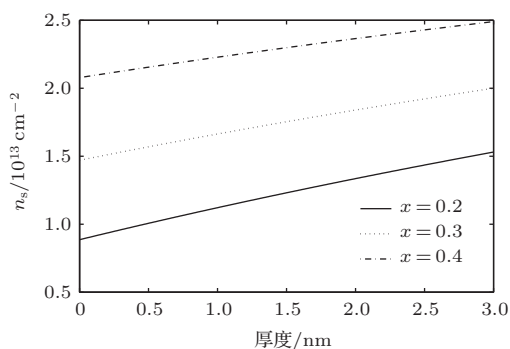


图2 不同 Al 组分下, AlN 层厚度和二维电子气体浓度的关系

Fig. 2. The relationship between the thickness of AlN and 2DEG sheet density under different Al mole fraction.

图3描述了 AlN 层厚度与界面粗糙度散射迁移率的关系曲线. 由图3可知, AlN 插入层会增强界面粗糙度散射, 降低迁移率, 且 Al 摩尔组分越小的时候, 对于迁移率的降低越明显. 根据 (8), (9), (10) 式, 界面粗糙度散射迁移率和二维电子气体的浓度的平方成反比, 而 AlN 层的插入会增大 2DEG 浓度, 所以会降低界面粗糙度散射迁移率. Al 摩尔

组分为 0.4 的时候, 即便增大 AlN 插入层的厚度, 界面粗糙度散射迁移率依然变化不大, 原因在于 Al 摩尔组分较高时, 没有 AlN 插入层 2DEG 浓度就已经足够大. 因此, 在高 Al 摩尔组分的情况下, AlN 插入层对于界面粗糙度散射的影响并不明显.

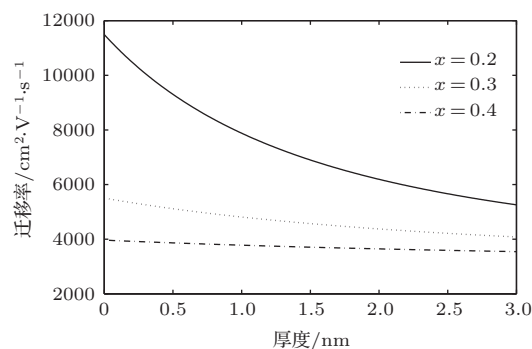


图3 不同 Al 组分下, AlN 层厚度和粗糙度散射迁移率的关系

Fig. 3. The relationship between the thickness of AlN and mobility limited by interface roughness scattering under different Al mole fraction.

由图4可知, AlN 层的引入可以大幅降低合金无序散射. 当 Al 摩尔组分为 0.3 且未插入 AlN 层时, 合金无序散射迁移率为 $6.07 \times 10^2 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 插入 1 nm 的 AlN 层后迁移率增大到 $1.42 \times 10^8 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 与此同时界面粗糙度散射迁移率为 $4.81 \times 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. 可见相对于界面粗糙度散射, 合金无序散射的影响在插入 AlN 层之后几乎可以忽略不计. 因为在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 中插入 AlN 层后, 从二维电子气进入 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层的电子大幅减少, 以致于合金无序散射迁移率的贡献可以忽略不计.

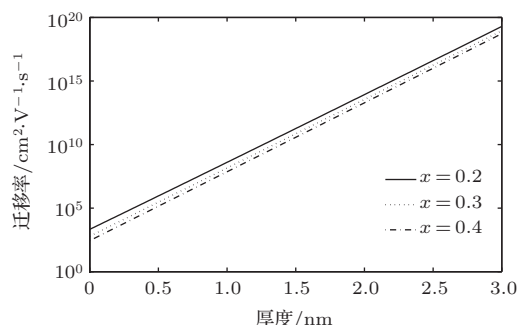


图4 不同 Al 组分下, AlN 厚度和合金无序散射迁移率的关系

Fig. 4. The relationship between the thickness of AlN and mobility limited by alloy disorder scattering under different Al mole fraction.

图5给出了 Al 摩尔组分分别为 0.2, 0.3, 0.4 时同时考虑合金无序散射和界面粗糙度散射的

2DEG 迁移率和 AlN 插入层厚度的关系曲线. 以 Al 摩尔组分为 0.2 为例, 没有 AlN 插入层即回到了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 情况下, 总迁移率只有 $1.79 \times 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 此时限制迁移率的主要散射机理是合金无序散射, 随着 AlN 插入层变厚, 由图 4 可知合金无序散射会大幅降低, 迁移率会不断增大, 最高可达 $9.33 \times 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 这时限制迁移率的主要散射机理已经由合金无序散射转变为界面粗糙度散射, 继续增大 AlN 厚度的时候, 由图 2 可知, 2DEG 浓度还会继续增大, 因为界面粗糙度散射迁移率和二维电子气体的浓度的平方成反比, 这时界面粗糙度散射已经成为主导散射机理, 所以迁移率会不断减小. 当 Al 摩尔组分为 0.3 和 0.4 的时候, 一开始迁移率也会因为合金无序散射降低而明显增大, 但是达到极大值之后, 随着 AlN 层变厚, 迁移率的降低并没有 Al 摩尔组分为 0.2 时那么明显. 如图 2 所示, Al 摩尔组分很高时, 没有 AlN 插入层 2DEG 浓度也很高, AlN 插入层对于 2DEG 浓度的提升并不明显, 也就意味着对于界面粗糙度散射的增强并不明显, 所以达到极大值之后, Al 摩尔组分为 0.3, 0.4 时的迁移率降低比 Al 摩尔组分 0.2 时平缓很多, 且 Al 摩尔组分越高, 迁移率降低越平缓.

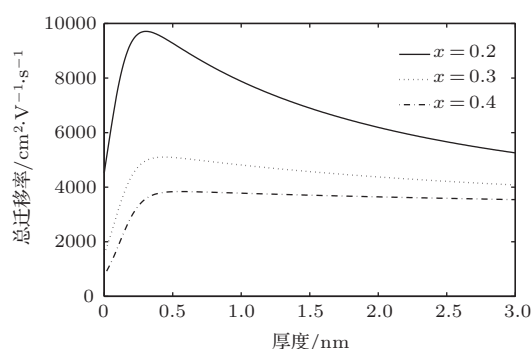


图 5 不同 Al 组分下, 总迁移率和 AlN 层厚度的关系

Fig. 5. The relationship between the thickness of AlN and total mobility under different Al mole fraction.

图 6 给出了不同 Al 组分下, 迁移率和 2DEG 浓度的乘积 $n\mu$ 与 AlN 层厚度的关系曲线, 而 $n\mu$ 决定着 HEMT 器件的输出功率. Al 摩尔组分为 0.2 时, $n\mu$ 随 AlN 插入层变厚而急剧增大, 在达到极大值之后又随着 AlN 插入层变厚而缓慢降低. 而 Al 摩尔组分为 0.3 和 0.4 时, $n\mu$ 先是随 AlN 插入层变厚而急剧增大, 当 AlN 插入层厚度达到一定值之后又缓慢增大. 所以, 我们可以得到, 在 Al 摩尔组分较低时, AlN 插入薄层可以得到更大的 $n\mu$, 而 Al 摩尔组分较高时, 较厚的 AlN 层可以得到更大的 $n\mu$. 在实际情况中, 由于生长工艺的限制, AlN 层厚度一

般都在 1 nm 以上, AlN 插入层厚度的不同会导致 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层中位错密度差别很大, 尤其是 AlN 层过厚时, 位错散射是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 双异质结中的重要散射过程. 针对 AlN 插入层引起位错密度的散射过程, 我们将在后续的工作中进行讨论.

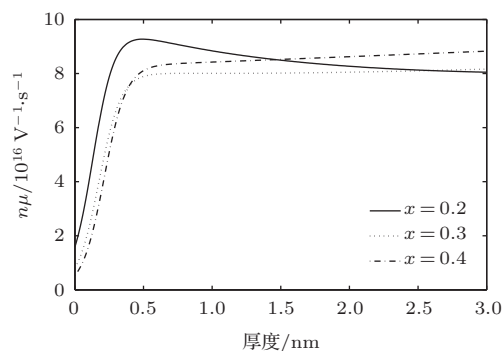


图 6 不同 Al 组分下, 迁移率和 2DEG 浓度的乘积与 AlN 层厚度的关系

Fig. 6. The relationship between the thickness of AlN and the product of mobility and 2DEG sheet density under different Al mole fraction.

4 结 论

本文给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 双异质结结构中的 2DEG 浓度解析表达式, 研究了 AlN 插入层厚度对 2DEG 浓度、界面粗糙度散射以及合金无序散射的影响. 计算结果表明: 1) AlN 插入层厚度增大, 2DEG 浓度会随之增大, 从而导致界面粗糙度散射增强, 迁移率减小; 2) 又因为 AlN 插入层厚度增大, 会导致合金无序散射大幅减小, 迁移率增大; 因此总迁移率会随 AlN 插入层厚度的增大而先增大后减小. 根据理论计算结果, 选择合适的 AlN 插入层厚度, 可以更好地控制 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ 材料的 2DEG 浓度和电子迁移率.

参考文献

- [1] Özgür A, Kim W, Fan Z, Botchkarev A, Salvador A, Mohammed S N, Sverdlov B, Morkoc H 1995 *Electron. Lett.* **31** 1389
- [2] Khan M A, Chen Q, Shur M S, Dermott B T, Higgins J A, Burm J, Schaff W, Eastman L F 1996 *IEEE Electron Device Lett.* **17** 584
- [3] Binari S C, Redwing J M, Kelner G, Kruppa W 1997 *Electron. Lett.* **33** 242
- [4] Ando T, Fowler A B, Stern F 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 437

- [5] Cao Y, Xing H, Jena D 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 222116
- [6] Masselink T, W 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1513
- [7] Hsu L, Walukiewicz W 1997 *Phys. Rev. B* **56** 1520
- [8] Wu M, Zheng D Y, Wang Y, Chen W W, Zhang K, Ma X H, Zhang J C, Hao Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 097307
- [9] Tang C, Xie G, Zhang L, Guo Q, Wang T, Sheng K 2013 *Chin. Phys. B* **22** 0106107
- [10] Ji D, Liu B, Lü Y W, Zou M, Fan B L 2012 *Chin. Phys. B* **21** 067201
- [11] Duan B X, Yang Y T 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 057302 (in Chinese) [段宝兴, 杨银堂 2014 物理学报 **63** 057302]
- [12] Zhu Y X, Cao W W, Xu C, Deng Y, Zou D S 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 117302 (in Chinese) [朱彦旭, 曹伟伟, 徐晨, 邓叶, 邹德恕 2014 物理学报 **63** 117302]
- [13] Yan J D, Wang X L, Wang Q, Qu S, Xiao H L, Peng E C, Kang H, Wang C M, Feng C, Yin H B, Jiang L J, Li B Q, Wang Z G, Hou X 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 054502
- [14] 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
- [15] Kim T W, Choo D C, Yoo K H, Jung M H, Cho Y H, Jae-Lee H, Jung-Lee H 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 103721
- [16] Zhou Z T, Guo L W, Xing Z G, Ding G J, Tan C L, Lü L, Liu J, Liu X Y, Jia H Q, Chen H, Zhou J M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6013 (in Chinese) [周忠堂, 郭丽伟, 邢志刚, 丁国建, 谭长林, 吕力, 刘建, 刘新宇, 贾海强, 陈弘, 周均铭 2007 物理学报 **56** 6013]
- [17] Makoto Miyoshi, Takashi Egawa, Hiroyasu Ishikawa, Kei-Ichiro Asai, Tomohiko Shibata, Mitsuhiro Tanaka, Osamu Oda 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 063713
- [18] Yu Y X, Lin Z J, Luan C B, Lü Y J, Feng Z H, Yang M, Wang Y, Chen H 2013 *AIP Adv.* **3** 092115
- [19] Luan C B, Lin Z J, Lü Y J, Zhao J T, Wang Y, Chen H, Wang Z G 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 044507
- [20] Hu W D, Chen X S, Yin F, Zhang J B, Luc W 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 084502
- [21] 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
- [22] Wang X D, Hu W D, Chen X S, Lu W 2012 *IEEE Trans. Electron Devices* **59** 1393
- [23] Zhang Y M, Feng S W, Zhu H, Zhang G C, Deng B, Ma L 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 094516
- [24] Zhang Y M, Feng S W, Zhu H, Zhang J, Deng B 2013 *Microelectron. Reliab.* **53** 694
- [25] Nitin Goyal, Benjamin Iñiguez, Tor A. Fjeldly 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 103505
- [26] Ferry D K, Goodnick S M, Bird J 2009 *Transport in Nanostructures* (2nd Ed.) (Cambridge: Cambridge University Press) p95
- [27] Liu B, Lu Y W, Jin G R, Zhao Y, Wang X L, Zhu Q S, Wang Z G 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 262111
- [28] Enrico Bellotti, Francesco Bertazzi, Michele Goano 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 123706

Effect of inserted AlN layer on the two-dimensional electron gas in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}^*$

Yang Peng Lü Yan-Wu[†] Wang Xin-Bo

(School of Science, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China)

(Received 19 April 2015; revised manuscript received 28 May 2015)

Abstract

This paper investigates the changes of electron transport properties in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ with an inserted AlN layer. The polarization charge density and two-dimensional electron gas (2DEG) sheet density in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ double heterojunction high electron mobility transistors (HEMT) affected by the spontaneous polarization and piezoelectric polarization in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and AlN barrier are studied. Relations of interface roughness scattering and alloy disorder scattering with the AlN thickness are systematically analyzed. It is found that the alloy disorder scattering is the main scattering mechanism in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterojunction high-electron-mobility transistors, while the interface roughness scattering is the main scattering mechanism in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$ double-heterojunction structure. It is also known that the 2DEG sheet density, interface roughness scattering and alloy disorder scattering are depended on the thickness of the inserted AlN layer. The 2DEG sheet density increases slightly and the mobility increases obviously by inserting an AlN layer about 1—3 nm. Taking Al mole fraction of 0.3 as an example, if without AlN layer, the 2DEG sheet density is $1.47 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ with the mobility limited by the interface roughness scattering of $1.15 \times 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, and the mobility limited by alloy disorder scattering of $6.07 \times 10^2 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. After inserting an AlN layer of 1 nm, the 2DEG sheet density increases to $1.66 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, and the mobility limited by the interface roughness scattering reduces to $7.88 \times 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ while the mobility limited by alloy disorder scattering increases greatly up to $1.42 \times 10^8 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Keywords: two-dimensional electron gas sheet density, mobility, interface roughness scattering, alloy disorder scattering

PACS: 73.61.Ey, 72.10.Fk, 72.20.Fr

DOI: 10.7498/aps.64.197303

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60976070).

[†] Corresponding author. E-mail: ywlu@bjtu.edu.cn