

$Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构中 Al 组分对 二维电子气性质的影响 *

孔月婵[†] 郑有 储荣明 顾书林

(南京大学物理系, 南京 210093)

(2002 年 8 月 12 日收到 2002 年 10 月 14 日收到修改稿)

通过用数值计算方法自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 研究了 Al 组分对 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构二维电子气性质的影响, 给出了 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构二维电子气分布和面密度, 导带能带偏移以及子带中电子分布随 $Al_x Ga_{1-x} N$ 势垒层中 Al 组分的变化关系, 并用 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构自发极化与压电极化机理和能带偏移对结果进行讨论分析.

关键词: $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构, 二维电子气, 自发极化, 压电极化

PACC: 7280E, 7340L, 7320D

1. 引 言

$Al_x Ga_{1-x} N$ 宽禁带半导体具有 3.4 至 6.2eV 范围内可调的直接带隙, 使得它非常适合于制作可见光范围内的短波段到紫外波段的光电器件, 同时, 与 GaAs 相比, GaN 具有电子峰值速率和饱和速率大, 热稳定性高等优点. 尤其是 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构界面处巨大的导带不连续性以及 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构体系非常强的极化效应, 提供一个很深的量子阱和很高浓度的二维电子气(2DEG), 它比传统的 AlGaAs/GaAs 体系高出一个数量级^[1-5], 因此是发展高温、高频、大功率电子器件和高电子迁移率场效应器件(HEMT)的理想结构材料. 正因为如此, $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构中二维电子气性质和 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ HEMT 器件已成为当前研究的热点.

由于 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构体系的界面导带不连续性和极化效应与 $Al_x Ga_{1-x} N$ 势垒层中 Al 组分密切相关从而将影响 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构中二维电子气的性质^[2, 6], 因此, 本文针对生长在蓝宝

石(c-Al₂O₃)衬底上的 Ga 面 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构, 深入研究了 Al 组分对异质结构中二维电子气性质的影响. 结果表明, 在 $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构中, 随 Al 组分增大, 界面附近二维电子气的浓度增大, 空间分布变窄且更加靠近异质界面, 分布在每一个子带中的二维电子气面密度均显著增加, 从第二个子带开始, 可以明显观察到二维电子气分布向异质界面靠近.

2. $Al_x Ga_{1-x} N/GaN$ 异质结构中极化与 二维电子气

六方结构的Ⅲ族氮化物半导体的一个突出性质是具有很强的极化效应, 极化包括自发极化 P_{SP} 和压电极化 P_{PE} . 自发极化由晶格常数比的非理想性引起^[7], 方向与生长方向([0001])相反, 因而对于纤锌矿结构 GaN 和 AlN, 自发极化强度均为负. 压电极化是由 AlGaN/GaN 界面处的应变效应和两种材料的晶格常数不匹配引起, 压电极化强度表示为^[8]

$$P_{PE} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right), \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号 10136020)和国家重点基础研究专项基金(批准号 G20000683)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: kyc-moon@163.com

其中 a_0 和 a 分别为平衡晶格常数和应变晶格常数, e_{31} 和 e_{33} 为压电常数, C_{13} 和 C_{33} 为弹性常数.

对于应变 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ 材料中任意 Al 组分，都满足以下关系：

$$\left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) < 0 , \quad (2)$$

由方程(1)和(2)可以得到应变AlGaN势垒层中的压电极化强度 P_{PE} 对于张应变($a > a_0$)为负,对于压应变($a < a_0$)为正.所以对于张应变,自发极化的方向与压电极化的方向平行,总极化为二者之和,即

$$P = P_{\text{SP}} + P_{\text{PE}}. \quad (3)$$

图 1 给出 AlGaN/GaN 异质结构、自发极化 P_{sp} 和压电极化 P_{pe} 及方向, 其中 AlGaN 势垒层为张应变.

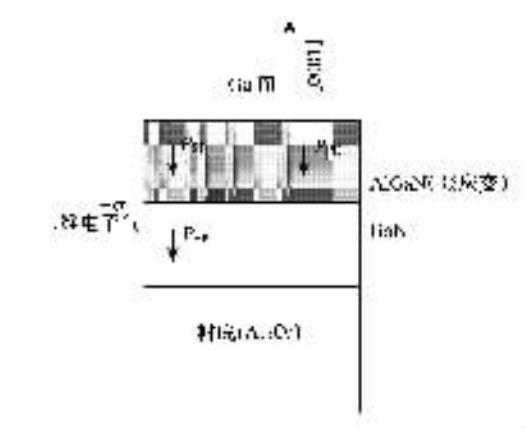


图 1 AlGaN/GaN 异质结构与极化

假定 AlGaN/GaN 为突变结, 则极化导致的界面处固定极化电荷为

$$|\sigma(x)| = |P_{\text{PF}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}N) + P_{\text{SP}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}N) - P_{\text{SP}}(\text{GaN})|, \quad (4)$$

$$|\sigma(x)| = \left| 2 \frac{a(0) - a(x)}{a(x)} \left\{ e_{31}(x) - e_{33}(x) \frac{C_{13}(x)}{C_{33}(x)} \right\} \right. \\ \left. + P_{\text{sp}}(x) - P_{\text{sp}}(0) \right|. \quad (5)$$

对于 Ga 面极化 ,自由电子由于补偿极化导致的正电荷 ($+ \sigma$)而在异质界面处形成二维电子气 ,如图 1 所示 . 对于未掺杂的 AlGaN/GaN 异质结构 ,二维电子气主要来源于 AlGaN 势垒层的表面态以及金属接触中的电子注入^[9,10] ,由束缚面电荷 $\sigma(x)$ 可以得到二维电子气面密度为^[3]

$$n_s(x) = \frac{\phi(x)}{e} - \left(\frac{\epsilon_0 \epsilon(x)}{d_{\text{AlGaN}} e^2} \right) [e\phi_b(x) + E_f(x) - \Delta E_c(x)], \quad (6)$$

其中 $\epsilon(x)$ 为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的相对介电常数, d_{AlGaN} 为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒层厚度, $e\phi_b$ 为肖特基势垒高度, $E_F(x)$ 为相对于 GaN 导带底能量的费米能级, ΔE_e 为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质界面处的导带不连续值。

3. 一维薛定谔方程和泊松方程的自洽求解

为了得到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质界面二维电子气的有关性质, 我们自洽求解了一维薛定谔方程和泊松方程. 将电子的状态看作是 x 和 y 两个方向上的二维布洛赫波与 z 方向上的一维波包的乘积, 则沿 z 轴自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 即可得到二维电子气的子能级和分布情况.

一维单电子薛定谔方程可写成

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \psi(z) = E\psi(z), \quad (7)$$

其中 \hbar 为普朗克常数, m^* 为电子有效质量, $V(z)$ 为电子势能, E 和 ψ 分别为电子能量和波函数.

一维泊松方程为

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d}{dz} \right) \phi(z) = -q [N_d^+(z) - n(z)], \quad (8)$$

其中 ϵ 为相对介电常数, ϕ 为静电势, q 为电子电荷, N_d^+ 为离化的施主浓度, n 为电子浓度. 由于受主电荷和空穴对总电荷的贡献很小, 计算中没有考虑受主电荷和空穴的影响.

自洽求解薛定谔方程和泊松方程的过程是：假定一个初始导带底能量 $V(z)$ ，其中异质界面处导带不连续值为 $\Delta E_c(x)$ ，随 Al 组分 x 增大而增加。将 $V(z)$ 代入薛定谔方程求解，得出二维电子气的能量和波函数，再假定一个费米能级 E_F ，并与电子波函数一起代入玻尔兹曼分布计算电荷密度，将电荷密度代入泊松方程求解，得出一个新 $V(z)$ 。如此反复迭代，直到最后两次计算所得导带底能量之差和费米能级之差小于某一值时结束循环。

4. 结果与分析

通过数值计算方法自洽求解上述薛定谔方程和泊松方程,得到了 $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ 异质界面二维电子气的有关性质,讨论了二维电子气的分布与面密度、导带能级和子带中的电子分布随 Al 组分的变化关系。设背景载流子浓度为 $10^{15} cm^{-3}$, $Al_xGa_{1-x}N$ 势

势层厚度为 10nm, 温度为 300K.

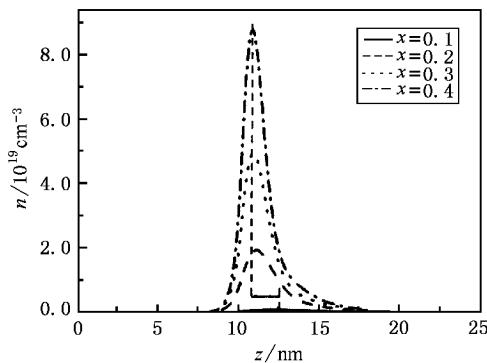


图 2 对应于不同 Al 组分 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质结构二维电子气的分布

图 2 为对应于不同 Al 组分时 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气的分布情况, 其中将 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ 外表面取为坐标原点. 可以看出, 随 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ 势垒层中 Al 组分的增加, 二维电子气的浓度增大, 且峰值更加接近异质界面(如箭头所示). 这是因为, 首先, 由于 AlN 和 GaN 的自发极化强度分别为 -0.081 和 -0.029 C/m^2 , 而 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ 的自发极化强度为二者的线性组合, 所以增大 Al 组分使得 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ 势垒层的自发极化增强, 同时压电极化强度随 Al 组分增大而增大, 所以由 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}$ 和 GaN 的总极化强度在异质界面处的差异变大, 导致的界面处极化电荷随之增大, 从而吸引更多电子到异质界面. 其次, 由于 AlN 的禁带宽度为 6.2 eV , 比 GaN 的禁带宽度 3.4 eV 大得多, Al 组分增加使得 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质界面处导带不连续性增大, 势

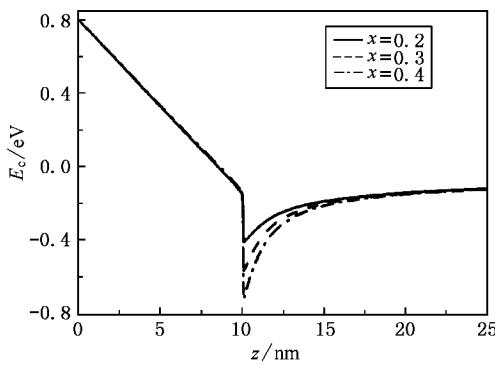


图 3 对应于不同 Al 组分 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质结导带能带图

阱变深. 图 3 为对应于不同 Al 组分的导带能带图, 当 Al 组分从 0.2 增加到 0.4 时, 导带不连续性从 0.28 eV 增加到 0.62 eV , 大大增加了势阱的深度, 同

时由图 3 还可以看出, 随 Al 组分增加, 势阱变窄, 从而对电子的量子限制作用增强, 导致了二维电子气浓度增加且距异质界面的距离减小.

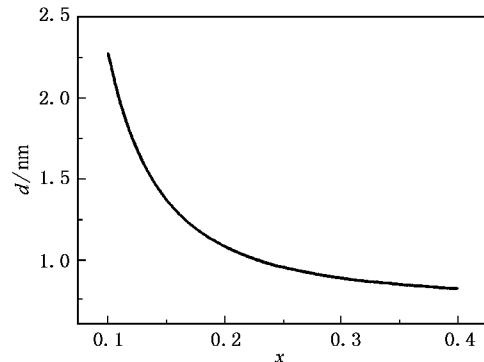


图 4 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气峰值浓度距界面的距离 d 与 Al 组分的关系

图 4 给出 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气的峰值浓度位置与 Al 组分的关系, 二维电子气峰值浓度位置为离开异质界面向半导体内部的距离. 可以明显看到, 随 Al 组分的增加, 二维电子气峰值浓度距界面的距离减小, 例如, 当 Al 组分从 0.15 增加到 0.35 时, 二维电子气峰值浓度距界面的距离从 1.36 nm 迅速减小到 0.8 nm . 这是因为由 Al 组分的增加导致的极化电荷使界面附近 GaN 层内电场按比例增强, 量子阱底部变窄, 所以子能级离量子阱底的高度增加且波函数分布变窄, 量子限制效应增强, 从而二维电子气分布变窄.

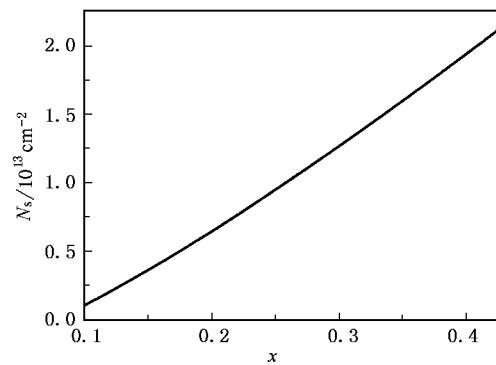


图 5 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质结构二维电子气面密度随 Al 组分的变化关系

图 5 为 $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{N}/\text{GaN}$ 异质结构二维电子气面密度 N_s 随 Al 组分的变化关系. 由图 5 可以看出, 不考虑弛豫的影响, 随 Al 组分的增加, 二维电子气面密度以略高于线性的方式增加, 当 Al 组分从 0.2 增

加到0.4时, 二维电子气面的密度从 $6.47 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 显著增加到 $1.94 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 。

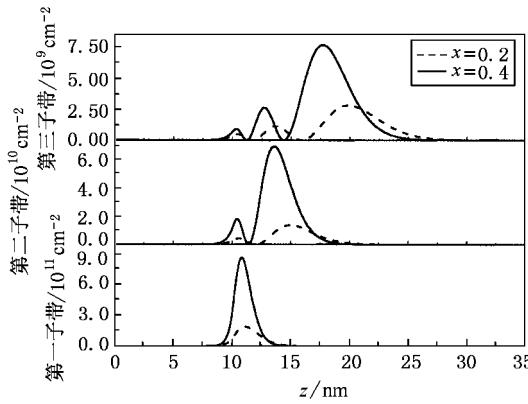


图 6 对应于不同 Al 组分, 不同子带中二维电子气的分布

图 6 为二维电子气在各子带中电子分布随 Al 组分变化情况。可以看出, 由于 Al 组分的增加导致总二维电子气面密度增大, 分布在每个子带中的二维电子气面密度的最大值均显著增加。例如, 当 Al 组分从 0.2 增加到 0.4 时, 第一个子带中二维电子

气面密度的最大值从 $1.9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 增加到 $8.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 说明改变 Al 组分对二维电子气面密度的影响很大。从第二个子带开始, 可以明显看到, 当 Al 组分增加时, 二维电子气分布变窄, 且更加靠近异质界面, 这也说明 Al 组分的增加导致极化增强与导带不连续增大使得界面处量子阱对二维电子气的限制性增强。

5. 结 论

用数值计算方法自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 讨论了 Al 组分对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气浓度和分布的影响。结果表明, 随 Al 组分的增加, 自发极化与压电极化增强, 导带不连续性增大, 量子阱变深, 对二维电子气的限制作用增强, 因而二维电子气浓度增大, 分布变窄且更加靠近异质界面。同时, 分布在各子带中的二维电子气面密度均显著增加, 并且从第二个子带开始, 二维电子气分布明显向异质界面靠近。这表明 Al 组分强烈影响 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气的性质。

- [1] Bykhovski A, Gelmont B L and Shur M S 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 6332
- [2] Asbeck P M, Yu E T, Lau S S, Sullivan G J, Van Hove J and Redwing J M 1997 *Electron. Lett.* **33** 1230
- [3] Yu E T, Sullivan G J, Asbeck P M, Wang C D, Qiao D and Lau S S 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 2794
- [4] Nardelli M B, Rapcewicz K and Bernhole J 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 3135
- [5] Takeuchi T, Takeuchi H, Sota S, Sakai H, Amano H and Akasaki I 1997 *Japan. J. Appl. Phys.* **36** L177
- [6] Keller S, Parish G, Fini P T, Heikman S, Chen C H, Zhang N, DenBaars S P, Speck J S and Mishra U K 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 5850
- [7] Bernardini F, Fiorentini V and Vanderbilt D 1997 *Phys. Rev. B* **56** R10024
- [8] Ambacher O, Foutz B, Smart J, Shealy J R, Weimann N G, Chu K, Murphy M, Sierakowski A J, Schaff W J, Eastman L F, Dimitrov R, Mitchell A and Stutzmann M 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 334
- [9] Ibbetson J P, Fini P T, Ness K D, DenBaars S P, Speck J S and Mishra U K 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 250
- [10] Ridley B K, Ambacher O and Eastman L F 2000 *Semicond. Sci. Technol.* **15** 270

Influnce of Al-content on the property of the two-dimensional electron gases in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures^{*}

Kong Yue-Chan[†] Zheng You-Dou Chu Rong-Ming Gu Shu-Lin

(Department of Physics ,Nanjing University , Nanjing 210093 , China)

(Received 12 August 2002 ; revised manuscript received 14 October 2002)

Abstract

By self-consistently solving the coupled Schrödinger and Poisson equations , we have investigated the property of the two-dimensional electron gases (2DEG) in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures . We demonstrate the dependence of the density , the distribution , and the subband occupation of the 2DEG on the Al-content of the AlGaN barrier . Band offset and mechanism of spontaneous and piezoelectric polarization were concerned to discuss our results .

Keywords : $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ heterostructures , two-dimensional electron gases , spontaneous polarization , piezoelectric polarization

PACC : 7280E , 7340L , 7320D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60136020) , and the Special Foundation for State Major Basic Research Program of China (Grant No. G20000683).

[†] Corresponding author. E-mail : kyc-moon@163.com