

# 纤锌矿 AlGa<sub>x</sub>N/AlN/GaN 异质结构中光学声子散射影响的电子迁移率\*

杨福军 班士良†

(内蒙古大学物理科学与技术学院, 呼和浩特 010021)

(2011年4月20日收到; 2011年11月1日收到修改稿)

对含有 AlN 插入层纤锌矿 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构, 考虑有限厚势垒和导带弯曲的实际异质结构, 同时计入自发极化和压电极化效应产生的内建电场作用, 采用数值自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 获得二维电子气 (2DEG) 中电子的本征态和本征能级. 依据介电连续模型和 Loudon 单轴晶体模型, 用转移矩阵法分析该体系中可能存在的光学声子模及三元混晶效应. 进一步, 在室温下计及各种可能存在的光学声子散射, 推广雷-丁平衡方程方法, 讨论 2DEG 分布及二维电子迁移率的尺寸效应和三元混晶效应. 结果显示: AlN 插入层厚度和 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 势垒层中 Al 组分的增加均会增强 GaN 层中的内建电场强度, 致使 2DEG 的分布更靠近异质结界面, 使界面光学声子强于其他类型的光学声子对电子的散射作用而成为影响电子迁移率的主导因素. 适当调整 AlN 插入层的厚度和 Al 组分, 可获得较高的电子迁移率.

**关键词:** AlGa<sub>x</sub>N/AlN/GaN 异质结构, 电子迁移率, 光学声子模, 三元混晶效应

**PACS:** 72.10.-d, 63.20.kd, 72.80.Ey, 73.21.Ac

## 1 引言

近年来, 基于 III 族氮化物的半导体材料被广泛应用于光电子器件领域, 其中 GaN 基高电子迁移率晶体管 (GaN-HEMT) 具有高输出阻抗、高击穿电压、低于沟道电阻的欧姆接触电阻等优良的光电特性, 成为当今半导体研究领域的热点之一. 具有强极化效应的纤锌矿 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN 是 GaN-HEMT 中采用的典型异质结构. 即使在未掺杂的情况下, 其界面处也可形成强量子局域化的高浓度二维电子气 (2DEG) (面密度数量级为  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ). 提高 2DEG 浓度和电子迁移率已成为优化器件性能的关键. 早在 1999 年, Gaska 等<sup>[1]</sup>和 Smorchkova 等<sup>[2]</sup>已分别运用金属有机物化学气相沉积 (MOCVD) 和分子束外延法生长出在低温下具有较高电子迁移率的 Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>N/GaN

和 Al<sub>0.09</sub>Ga<sub>0.91</sub>N/GaN 异质结构. 2006 年, Tao 等<sup>[3]</sup>仍用 MOCVD 方法获得 Al<sub>0.22</sub>Ga<sub>0.78</sub>N/GaN 异质结构, 且指出在高温下 2DEG 的迁移率主要受纵光学 (LO) 声子散射.

文献 [4—6] 从理论上研究了 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN 异质结构中载流子迁移率的散射机制, 主要包括合金无序散射、离化杂质散射、界面粗糙度散射、声学声子散射以及极化光学声子散射. 根据已有的理论和实验结果, 合金无序散射 (即三元混晶效应) 在此类异质结构中制约着 2DEG 迁移率的提高. 已有实验研究表明<sup>[7—9]</sup>, 在 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN 单异质结界面处插入一 AlN 隔离薄层 (厚度约为 1—2 nm) 形成 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构, 可有效地减少 2DEG 受到 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 势垒层的合金无序散射, 从而大幅度提高电子的迁移率. 因此, Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构在高电子迁移

\* 国家自然科学基金 (批准号: 60966001)、内蒙古自治区自然科学基金重点项目 (批准号: 20080404Zd02) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20070126001) 资助的课题.

† E-mail: slban@imu.edu.cn

率晶体管 (HEMT) 应用方面更具吸引力. Miyoshi 等<sup>[10]</sup> 采用金属有机物气相外延法, 在 AlN 缓冲层上生长出 Al<sub>0.26</sub>Ga<sub>0.74</sub>N/AlN/GaN 异质结构, 在室温下得到高达 2100 cm<sup>2</sup>/Vs 的迁移率. Tülek 等<sup>[11]</sup> 用 MOCVD 方法分别生长了 Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>N/AlN/GaN 和 Al<sub>0.88</sub>In<sub>0.12</sub>N/AlN/GaN 异质结构, 并在室温下测出其电子迁移率分别为 1700 和 812 cm<sup>2</sup>/Vs. Miyoshi 等<sup>[12]</sup> 从理论上分析了 Al<sub>0.26</sub>Ga<sub>0.74</sub>N/GaN 和 Al<sub>0.26</sub>Ga<sub>0.74</sub>N/AlN/GaN 异质结构中各种散射机制下电子迁移率随温度的变化关系. 但是, 文献<sup>[12]</sup> 并没有考虑 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 势垒层和 AlN 插入层厚度的变化以及 Al 组分的变化 (特别是当插入层较薄时三元混晶效应更为重要) 对于电子迁移率的影响.

在室温和高于室温的条件下, 光学声子散射是影响 HEMT 中二维电子迁移率的主要机制. 国内外作者对氮化物材料以及单异质结构、单量子阱的声子模式、电子和声子的相互作用以及电子输运已有较系统的研究. Lee 等<sup>[13]</sup> 基于微观介电连续模型和单轴模型给出纤锌矿异质结构中电子和声子相互作用哈密顿量. Komirenko 等<sup>[14]</sup> 研究了纤锌矿 AlN/GaN 量子阱中界面光学 (IO) 声子和局域光学 (CO) 声子对电子的散射, 研究表明, 在室温条件下这两种光学声子对电子散射起主导作用. Qu 等<sup>[15]</sup> 计入内建电场作用, 计算了有限厚势垒纤锌矿 AlN/GaN 量子阱中光学声子散射下的电子迁移率, 发现在窄阱和宽阱情形下 IO 声子散射对迁移率起主导作用, 而在中间阱宽情形下 CO 声子散射则对电子迁移率影响较大. 但是, 文献<sup>[15]</sup> 在计算中没有考虑阱中高浓度 2DEG 带来的导带弯曲对电子分布的影响. 最近, Qu 等<sup>[16]</sup> 研究发现, 在含有三元混晶的纤锌矿氮化物量子阱中混晶组分的增加会导致体系声子模式发生转变, 还发现引入 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 纳米凹槽可调制 AlN/GaN/AlN 量子阱的光学声子模式, 且随着凹槽层中 In 组分的变化对电子迁移率起主导作用的散射声子模也发生改变<sup>[17]</sup>. 但是以上理论研究仅限于对称阱结构, 并且没有考虑纳米凹槽尺寸变化对迁移率的影响. 对于多层材料, 特别是含有三元混晶的非对称量子结构 (如 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构) 的声子模式以及电子迁移率混晶效应和尺寸效应的理论研究有待深入. 这些因素对于改善光电子器件性能有

着重要意义.

本文以含有 AlN 插入层纤锌矿 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N / AlN / GaN 异质结构中的 2DEG 为研究对象, 考虑有限厚势垒和导带弯曲的实际异质结构, 同时计入自发极化和压电极化效应产生的内建电场作用, 采用数值自洽求解薛定谔方程和泊松方程获得电子的本征态和本征能级. 然后, 依据介电连续模型和 Loudon 单轴晶体模型, 用转移矩阵法分析该体系中可能存在的光学声子模及其三元混晶效应. 在此基础上, 推广雷-丁平衡方程方法, 在光学声子起主要作用的温区, 计及各种可能存在的光学声子散射, 系统讨论 2DEG 分布和电子迁移率的尺寸效应和混晶效应.

## 2 模型与理论

所选 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构如图 1 所示, 设该异质结构沿晶体对称轴 *c* 轴即 [0001] 方向生长, 记为 *z* 轴, 异质界面所在的平面为 *x-y* 平面, 且各界面位于  $z = z_i (i = 1, 2, 3)$  处. 将垂直于 *z* 轴方向 (即 *x-y* 平面) 标记为 “⊥”, *z* 轴标记为 “*z*”, 并依次将势垒层 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N, 插入层 AlN 和沟道层 GaN 标记为 1, 2 和 3. 在本文的理论计算中, 均未考虑 AlN 缓冲层和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 衬底的影响.

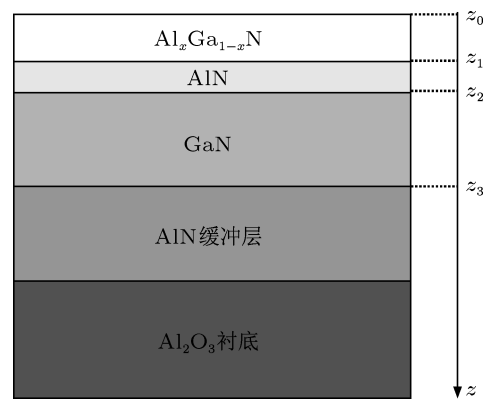


图 1 纤锌矿 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构示意图

### 2.1 电子波函数的自洽求解

在所讨论的体系中, 由于 2DEG 在 *x-y* 平面内是自由的, 而在 *z* 方向受到限制, 故可将电子波函数表示为

$$\Phi_m(\rho, z) = \left(1/\sqrt{S}\right) \varphi_m(z) \exp(i\mathbf{k}_\perp \cdot \rho), \quad (1)$$

其中,  $S$  为异质界面的面积,  $\mathbf{k}_\perp$  和  $\boldsymbol{\rho}$  分别为二维波矢和位矢. 欲获得二维电子的本征态  $\varphi_m(z)$  以及相应的本征能级  $E_m$ , 可在  $z$  方向自洽求解薛定谔方程 - 泊松方程. 在有效质量近似下, 一维单电子薛定谔方程为

$$\begin{aligned} & \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_C(z) \right. \\ & \left. + V_H(z) + eF(z)z \right\} \varphi_m(z) \\ & = E_m \varphi_m(z). \end{aligned} \quad (2)$$

这里,  $\hbar = h/(2\pi)$ ,  $h$  为普朗克常数,  $m^*(z)$  是与位置有关的电子有效质量,  $e$  是电子电荷,  $F(z) = F_i$  是体系中内建电场强度 (详见附录 A).  $V_C(z)$  为体系导带带阶. 在计算中, 选取 GaN 导带底为势能零点, 则  $V_C(z)$  可表示为

$$V_C(z) = \begin{cases} 0.765(E_{g1} - E_{g2}) & (0 < z < z_1), \\ 0.765(E_{g2} - E_{g3}) & (z_1 < z < z_2), \\ 0 & (z_2 < z < z_3), \end{cases} \quad (3)$$

其中  $E_{gj}$  为第  $j$  层材料的禁带宽度.  $V_H(z)$  是与静电相互作用相关的 Hartree 势, 可由泊松方程确定 [18]

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon^s(z) \frac{\partial}{\partial z} V_H(z) \right) \\ & = -e^2 \begin{cases} [N_D^+ - N_{2D}(z)] & (0 < z < z_1), \\ -N_{2D}(z) & (z_1 < z < z_2), \\ -N_{2D}(z) & (z_2 < z < z_3), \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

其中,  $\varepsilon^s(z)$  是与位置有关的静态介电常数,  $N_D^+(z)$  是离化杂质浓度, 可表示为

$$N_D^+(z) = N_D \left( 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp((E_D - E_F)/(k_B T))} \right). \quad (5)$$

这里,  $N_D$  为掺杂浓度,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为材料温度,  $E_F$  为费米能级,  $E_D$  为施主能级,  $N_{2D}(z)$  为所有子带二维电子的浓度总和.  $N_{2D}$  与电子波函数之间的关系为

$$N_{2D}(z) = \sum_m |\varphi_m(z)|^2 n_m, \quad (6)$$

其中  $n_m$  表示  $m$  束缚态上的电子浓度, 可表示为

$$n_m(z) = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_m}{k_B T} \right) \right]. \quad (7)$$

$E_F$  可由下列电中性条件解得:

$$\int_0^{z_3} [N_D^+(z) - N_{2D}(z)] dz = 0. \quad (8)$$

采用迭代法通常可求得薛定谔 - 泊松方程的自洽解 [19].

## 2.2 光学声子模

依据介电连续模型和单轴晶体模型, 本文所考虑的异质结体系满足下列静电方程组 [20]:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \phi_{\lambda,j}(q, \mathbf{r}), \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{r}) &= \varepsilon_{j,\perp}(\omega) \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}) \hat{\rho} \\ &+ \varepsilon_{j,z}(\omega) E_z(\mathbf{r}) \hat{z}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r}). \quad (11)$$

在上述方程组中,  $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r})$  和  $E_z(\mathbf{r})$  分别为总电场强度  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  在  $x$ - $y$  平面和  $z$  方向的分量,  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$  为电位移矢量,  $\phi_{\lambda,j}(q, \mathbf{r})$  为第  $j$  层材料中  $\lambda$  支声子势,  $\rho_0(\mathbf{r})$  为自由电荷密度,  $\varepsilon_{j,\perp}(\omega)$  和  $\varepsilon_{j,z}(\omega)$  分别为各层材料在  $x$ - $y$  平面和  $z$  方向的介电函数.

由 (9)–(11) 式解得  $z$  方向上的声子势形式为 [20]

$$\begin{aligned} \phi_{\lambda,j}(q, z) &= c_{j+} \exp(ik_j z) + c_{j-} \exp(-ik_j z) \\ &(j = 1, 2, 3), \end{aligned} \quad (12)$$

其中  $k_j = \sqrt{-\varepsilon_{j,\perp}(\omega)/\varepsilon_{j,z}(\omega)}q$  为声子在  $z$  方向的波矢.

依据 Loudon 模型 [21], AlN 和 GaN 依赖声子频率  $\omega$  变化的介电函数可表示为

$$\varepsilon_{j,\perp}(\omega) = \varepsilon_{j,\perp}^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{j,\perp 1}^2}{\omega^2 - \omega_{j,\perp t}^2}, \quad (13)$$

$$\varepsilon_{j,z}(\omega) = \varepsilon_{j,z}^\infty \frac{\omega^2 - \omega_{j,z 1}^2}{\omega^2 - \omega_{j,z t}^2}. \quad (14)$$

而对于三元混晶材料  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , 考虑到 LO 声子为单模 (记为 “1”), 而横光学 (TO) 声子为双模 (分别记为 “ta” 和 “tb”). 故采用 Qu 等 [16] 对  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  介电函数的构造, 即

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{AlGa}\perp}(\omega) &= \text{sign}(\omega^2 - \omega_{\text{AlGa}\perp 1}^2) \varepsilon_{\text{AlGa}\perp}^\infty \\ &\times \frac{(\omega^2 - \omega_{\text{AlGa}\perp 1}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{\perp ta}^2)(\omega^2 - \omega_{\perp tb}^2)}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{AlGa}z}(\omega) &= \text{sign}(\omega^2 - \omega_{\text{AlGa}z 1}^2) \varepsilon_{\text{AlGa}z}^\infty \\ &\times \frac{(\omega^2 - \omega_{\text{AlGa}z 1}^2)^2}{(\omega^2 - \omega_{z ta}^2)(\omega^2 - \omega_{z tb}^2)}, \end{aligned} \quad (16)$$

其中,  $\omega_{\text{AlGa}\perp 1}$ ,  $\omega_{\text{AlGa}z 1}$  由修正的无规元素等位移 (MREI) 模型 [22] 拟合获得,  $\omega_{\perp ta}$ ,  $\omega_{\perp tb}$ ,  $\omega_{z ta}$ ,

$\omega_{ztb}$  则由 Holtz 等 [23] 提出的拟合方法获得. 当  $\varepsilon_{j,\perp}\varepsilon_{j,z} < 0$  或  $\varepsilon_{j,\perp}\varepsilon_{j,z} > 0$  时, 分别得到振荡或衰减的声子势. 光学声子模的色散关系以及声子势的求解见附录 B.

### 2.3 光学声子限制的电子迁移率

根据雷-丁平衡方程理论, 声子限制的二维电子迁移率  $\mu$  可表示为 [24]

$$\frac{1}{\mu} = \frac{2\hbar}{en_s^2 k_B T} \sum_{m,m'} |F_{mm'}(q, \lambda)|^2 \times q_x^2 \Pi(q, \omega) \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}{1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)}, \quad (17)$$

其中,  $n_s$  是电子面密度,  $|F_{mm'}(q, \lambda)|$  是电子与  $\lambda$  支声子的 Fröhlich 相互作用矩阵元 [24],

$$|F_{mm'}(q, \lambda)| = \left| e \int dz \varphi_{m'}^\dagger(z) \phi_{\lambda,j}(q, z) \varphi_m(z) \right|. \quad (18)$$

在 (17) 式中, 电子密度关联函数的虚部  $\Pi(q, \omega)$  可表示为

$$\Pi(q, \omega) = \frac{Sm_\perp}{\pi\hbar^3 q} \left( \frac{m_\perp k_B T}{2} \right)^{1/2} \times [g(\phi_- - \phi_F) - g(\phi_+ - \phi_F)]. \quad (19)$$

这里,

$$\phi_F = \frac{E_F}{k_B T},$$

$$\phi_\pm = \phi_F \frac{(\hbar\omega m_\perp \pm \hbar^2 q_\perp^2 / 2)^2}{\hbar^4 k_F^2 q_\perp^2},$$

$$g(y) = \int_0^\infty \{[\exp(y+z) + 1] \sqrt{z}\}^{-1} dz,$$

其中  $k_F$  是电子费米波矢.

### 3 数值计算结果与分析

下面我们选取  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$  异质结构进行数值计算, 计算中所用参量取值 [22,25-29] 列于表 1,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  的相应参量可用线性插值获得.

### 3.1 2DEG 分布的尺寸效应和三元混晶效应

当 Al 组分  $x = 0.3$ ,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  势垒层取 6 nm, GaN 沟道层取 12 nm, AlN 插入层厚度  $d_i$  分别取 2, 4, 6 nm, 势垒层掺杂浓度为  $1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 掺杂厚度为 6 nm, 施主能级  $E_D$  取导带底 0.03 eV 时, 自洽求解 (2) 和 (4) 式得到异质结构的导带边和电子基态波函数如图 2(a) 所示. 这里, 取  $d_i$  为 2 nm 时  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  势垒层的边界处为  $z$  方向的零点. 结果显示: 电子距离 AlN/GaN 界面的平均距离  $l_i$  分别为 1.498, 1.275, 1.151 nm. 从图 2(a) 可以看出, 随着  $d_i$  的增加, 2DEG 会逐渐向该界面靠近. 一方面, 随着  $d_i$  的增加, 其势垒高度也逐渐增加, 则电子被推向沟道层中; 另一方面, GaN 中的内建电场  $F_3$  又随着  $d_i$  的增加而逐渐增强 (当  $d_i$  分别为 2, 4, 6 nm 时,  $F_3$  则分别为 1.24, 1.83, 2.32 MV/cm), 进而使 GaN 中导带升高, 使电子更靠近界面. 电子的移动方向取决于上述两方面竞争的结果, 但后者对电子的作用大于前者, 致使 2DEG 随着  $d_i$  的增加而逐渐向 AlN/GaN 界面靠近. 图 2(b) 给出不同 Al 组分下,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$  异质结构各层厚度分别为 6, 2, 12 nm 时导带位置和电子的基态波函数 ( $z$  方向零点选为  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  势垒层的边界

表 1 计算中所用参量取值

| 参量   | 取值 (AlN) | 取值 (GaN) |
|--|----------|----------|
| $\omega_{zt}/\text{cm}^{-1}$               | 614      | 532      |
| $\omega_{z1}/\text{cm}^{-1}$               | 888      | 734      |
| $\omega_{\perp t}/\text{cm}^{-1}$          | 673      | 559      |
| $\omega_{\perp 1}/\text{cm}^{-1}$          | 898      | 741      |
| $a/\text{nm}$                              | 0.3112   | 0.3189   |
| $E_g/\text{eV}$                            | 6.14     | 3.43     |
| $P^{\text{SP}}/\text{C}\cdot\text{m}^{-2}$ | -0.010   | -0.036   |
| $m_\perp/m_0$                              | 0.32     | 0.19     |
| $m_z/m_0$                                  | 0.33     | 0.21     |
| $\varepsilon_z^\infty/\varepsilon_0$       | 5.36     | 6.38     |
| $\varepsilon_\perp^\infty/\varepsilon_0$   | 5.17     | 6.11     |
| $\varepsilon^s/\varepsilon_0$              | 8.5      | 8.9      |
| $e_{31}/\text{C}\cdot\text{m}^{-2}$        | -0.64    | -0.44    |
| $e_{33}/\text{C}\cdot\text{m}^{-2}$        | 1.80     | 0.86     |
| $C_{11}/\text{GPa}$                        | 396      | 390      |
| $C_{12}/\text{GPa}$                        | 137      | 145      |
| $C_{13}/\text{GPa}$                        | 108      | 106      |
| $C_{33}/\text{GPa}$                        | 373      | 398      |

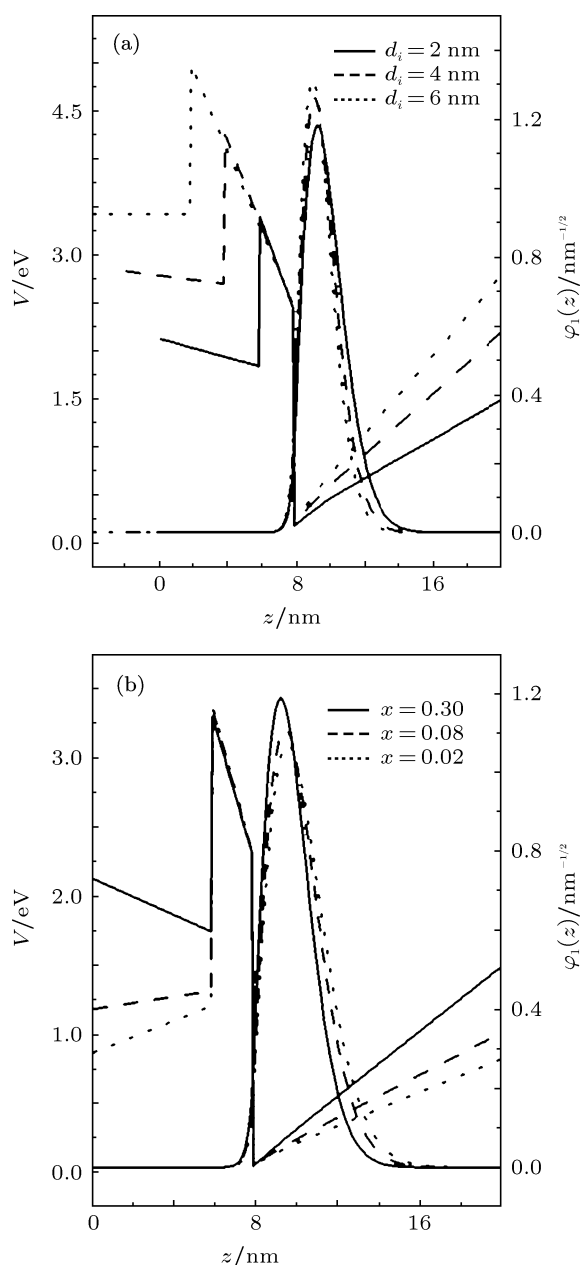


图2  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$  异质结构导带图和电子的基态波函数 (a) 取不同 AlN 插入层厚度; (b) 取不同 Al 组分含量

处,下同). 结果表明:  $x$  的增加同样会使  $F_3$  增大, 导致电子向 AlN/GaN 界面移动. 由图 2 还可看出, 随着  $d_i$  和  $x$  的增大, 电子波函数的峰值也有所提高, 这标志着 2DEG 的浓度也逐渐提高. 以上结果提示, 界面光学声子对 2DEG 迁移率有很重要的影响. 应当指出: 在本文计算中, 由于强内建电场的作用远胜于 Hartree 自洽势产生的导带弯曲效应, 使导带在 GaN 中呈近线性, 在界面处呈近三角形势阱.

### 3.2 光学声子模的三元混晶效应

Qu 等<sup>[16]</sup> 所讨论的含有三元混晶异质结构的声学声子模式会随着  $x$  的变化而表现出与二元化合物组成的异质结构完全不同的形态. 我们拓展文献 [16] 的讨论, 由 MREI 模型得到光学声子模式变化的临界组分, 分别为  $x = 0.03, 0.132, 0.436, 0.887, 0.902, 0.92$ . 这里分别选取处于不同区间的  $x = 0.02, 0.08, 0.3, 0.5, 0.89, 0.91$  和  $0.97$ , 计算相应声子模的色散关系以及声子势.

首先讨论 IO 声子. 其势在每个界面处最大, 并向两侧以指数形式衰减, 即要求  $\epsilon_{1,\perp}\epsilon_{1,z} > 0$ ,  $\epsilon_{2,\perp}\epsilon_{2,z} > 0$ ,  $\epsilon_{3,\perp}\epsilon_{3,z} > 0$ ,  $\epsilon_{1,z}\epsilon_{2,z} < 0$ ,  $\epsilon_{2,z}\epsilon_{3,z} < 0$ . 再依据附加边界条件<sup>[30]</sup>  $\phi_{\text{IO},1}(q, z)|_{z \rightarrow -\infty} = 0$ ,  $\phi_{\text{IO},3}(q, z)|_{z \rightarrow +\infty} = 0$  可解得声子的色散关系满足  $M_{22} = 0$ . 由于篇幅关系, 本文只给出 Al 组分为  $0.02, 0.08$  和  $0.3$  ( $0 \leq x < 0.436$ ) 时, 所有可能存在的 IO 模色散关系和声子势分布 (图 3).

为了便于比较, 图 3 还给出  $x = 0$  时 IO 声子的色散关系和声子势. 此时, IO 声子存在的频率范围为  $\omega \in (\omega_{3,\perp t}, \omega_{2,z t})$  或  $\omega \in (\omega_{3,\perp l}, \omega_{2,z l})$ . 图 3(a) 中的实线为色散关系, 横坐标中  $q$  为声子的波矢, 取  $d$  为 AlN 层的厚度 ( $d = 2 \text{ nm}$ ). 因此, 对于给定的波矢  $q$  最多有四支 IO 声子 (两支 LO 和两支 TO). 这里, 按频率由高到低的顺序, 分别将各支声子标记为  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  和  $\omega_4$ . 当  $qd \rightarrow \infty$  时,  $\omega_1$  和  $\omega_2$  逐渐趋于同一个渐近频率  $826.594 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\omega_3$  和  $\omega_4$  也逐渐趋于同一渐近频率  $580.473 \text{ cm}^{-1}$ . 当  $x = 0.02, 0.08$  和  $0.3$  时, 则 IO 声子可能存在的频率范围为  $\omega \in (\omega_{1,\perp l}, \omega_{2,z l})$ . 对于给定的  $q$ , 最多存在两支 IO 声子, 且均为 LO 声子 ( $\omega_1$  和  $\omega_2$ ). 随着  $qd \rightarrow \infty$ , 当  $x = 0.02$  时,  $\omega_1$  逐渐趋于  $850.175 \text{ cm}^{-1}$ , 而  $\omega_2$  则趋于  $826.594 \text{ cm}^{-1}$ , 二者之差  $\Delta\omega_{0.02} = 23.581 \text{ cm}^{-1}$ ; 当  $x = 0.08$  和  $0.3$  时,  $\Delta\omega_{0.08}$  和  $\Delta\omega_{0.3}$  分别为  $39.368$  和  $45.231 \text{ cm}^{-1}$ . 由此可知, Al 组分的增加导致异质结体系本身的不对称性, 使得两支纵界面光学声子模趋于不同的渐近频率, 并且这两个渐近频率之差  $\Delta\omega_x$  也随着 Al 组分的增加而逐渐增大.

当  $x = 0.5, 0.89, 0.91$  和  $0.97$  ( $0.436 < x < 1$ ) 时, IO 声子模不同于  $0 \leq x < 0.436$  时的情形. 此时, IO 声子存在的频率范围为  $\omega \in (\omega_{3,\perp t}, \omega_{z t b})$  或  $\omega \in (\omega_{1,\perp l}, \omega_{2,z l})$ , 即分别存在一支 LO 声子和一

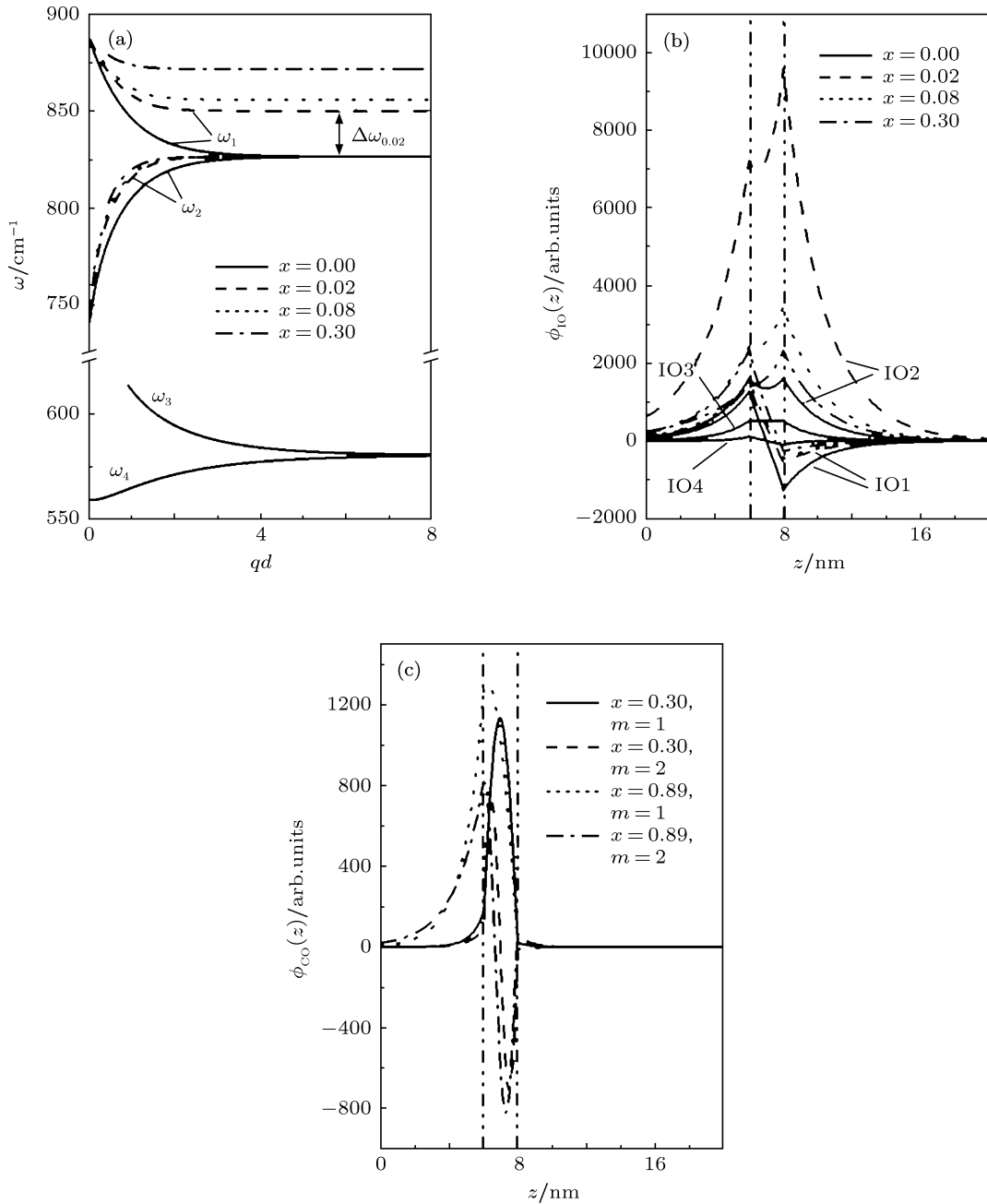


图3 取不同Al组分的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  (6 nm)/AlN (2 nm)/GaN (12 nm) 异质结构中IO声子的色散关系以及IO和CO声子势。垂直虚线表示异质结界面所处位置。(a)IO声子的色散关系;(b)IO声子势;(c)CO声子势

支TO声子. 由此可知, 在低组分 ( $0 \leq x < 0.436$ ) 时, 只存在两支纵IO声子模, 随着Al组分的增加 ( $0.436 < x < 1$ ), 其中一支LO声子模将转化为TO声子模.

作为对比, 图3(b)中的实线给出  $x = 0$  时IO声子的静电势分布. 从图3(b)可以看出, 当  $q = 0.45 \text{ nm}^{-1}$  时, 四支IO声子的静电势之绝对值均在GaN/AlN界面  $z = z_1 = 6 \text{ nm}$  和  $z = z_2 = 8 \text{ nm}$  处达到最大, 并向两边材料呈指数衰减, 在体系边

界处几乎衰减为零, 且每支IO声子势在两个界面处峰值的绝对值均相等. 而当  $x = 0.02, 0.08, 0.3$ ,  $q = 0.45 \text{ nm}^{-1}$  时, 两支IO声子势的绝对值分别在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$  界面  $z = z_1 = 6 \text{ nm}$  和  $\text{AlN}/\text{GaN}$  界面  $z = z_2 = 8 \text{ nm}$  处各达到不相等的峰值. 低频支IO声子(记为IO2)势的最大值出现在AlN/GaN界面  $z = z_2 = 8 \text{ nm}$  处, 且最大值随着  $x$  的增加而逐渐降低. 而高频支IO声子(记为IO1)势的最大值出现在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}$  界面  $z = z_1 = 6 \text{ nm}$  处,

但最大值随着  $x$  的增加而升高.

接着讨论 CO 声子. 其势在 AlN 中振荡, 而在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  和 GaN 中呈指数衰减, 即要求  $\varepsilon_{1,\perp}\varepsilon_{1,z} > 0$ ,  $\varepsilon_{2,\perp}\varepsilon_{2,z} < 0$ ,  $\varepsilon_{3,\perp}\varepsilon_{3,z} > 0$ . 依据附加边界条件  $\phi_{\text{CO},1}(q, z)|_{z \rightarrow -\infty} = 0$ ,  $\phi_{\text{CO},3}(q, z)|_{z \rightarrow +\infty} = 0$ , 可解得 CO 声子的色散关系满足  $M_{22} = 0$ , 且存在的频率范围为  $\omega \in$

$(\omega_{2,z1}, \omega_{2,\perp1})$ , 但与  $x$  的取值无关. 不失一般性, 本文仅给出  $q = 1.5 \text{ nm}^{-1}$ ,  $x = 0.3, 0.89$  时, 最高频率的两支 ( $m = 1, 2$ ) CO 声子势 (图 3(c)). 由于结构的不对称, 导致该势都不具有对称性. 另外, 随着  $x$  的增加, 由于带阶导致声子势在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  层中的隧穿逐渐增大, 而在 GaN 层中的隧穿则基本不变, 且静电势振荡的波幅也随着  $x$  的增加而逐渐增大.

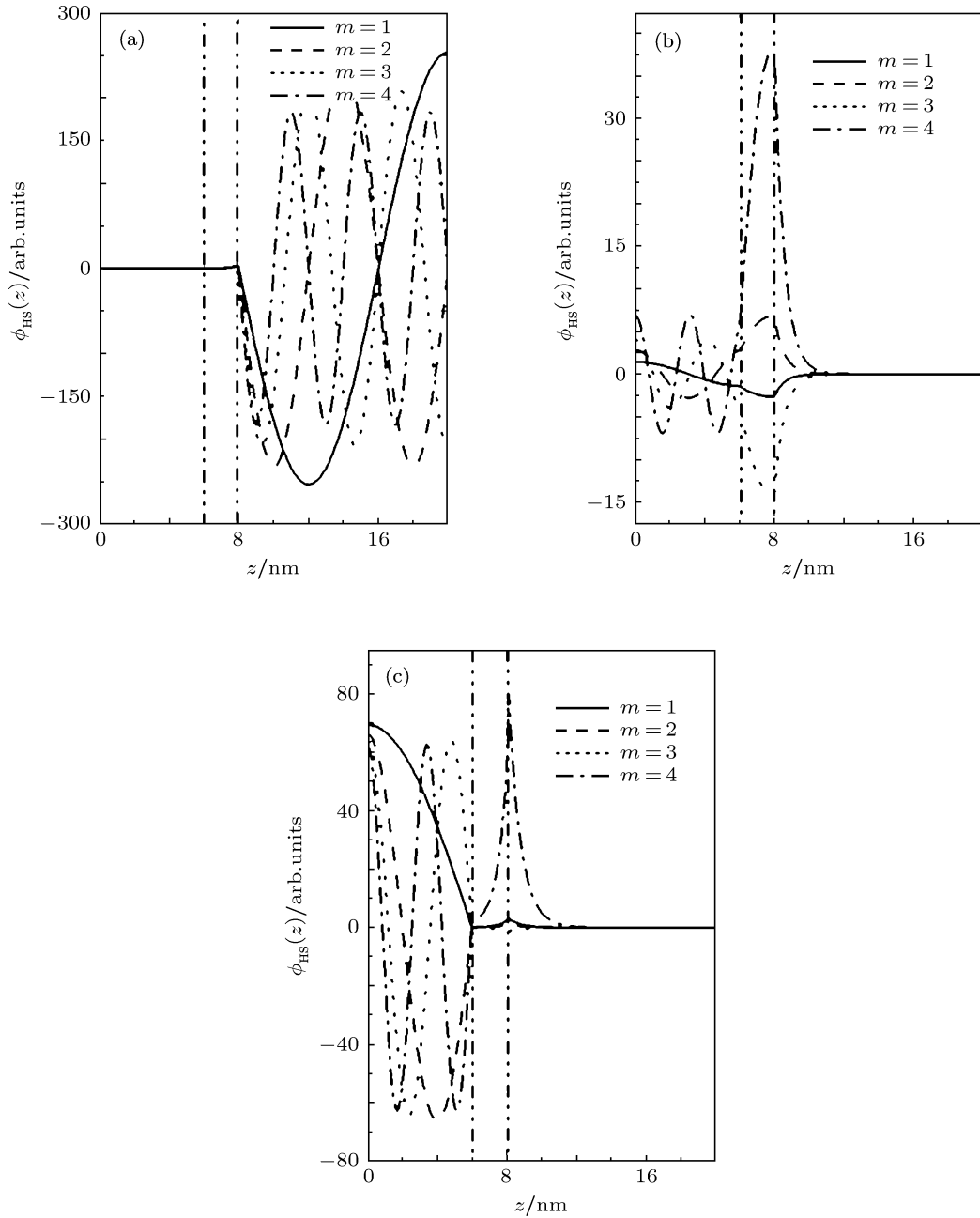


图 4 Al 组分  $x = 0.3$  时,  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  (6 nm)/AlN (2 nm)/GaN (12 nm) 异质结构中的三种 HS 声子势. 垂直虚线表示异质界面所处位置. (a) 第一种 HS 声子势; (b) 第二种 HS 声子势; (c) 第三种 HS 声子势.

最后讨论半空间 (HS) 声子. 该声子有以下三种类型: 第一种是在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  和  $\text{AlN}$  中呈指数衰减, 在  $\text{GaN}$  中振荡 (记为 HS1), 即要求  $\varepsilon_{1,\perp}\varepsilon_{1,z} > 0$ ,  $\varepsilon_{2,\perp}\varepsilon_{2,z} > 0$ ,  $\varepsilon_{3,\perp}\varepsilon_{3,z} < 0$ . 第二种是在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  和  $\text{AlN}$  中振荡, 在  $\text{GaN}$  中呈指数衰减 (记为 HS2), 即要求  $\varepsilon_{1,\perp}\varepsilon_{1,z} < 0$ ,  $\varepsilon_{2,\perp}\varepsilon_{2,z} < 0$ ,  $\varepsilon_{3,\perp}\varepsilon_{3,z} > 0$ . 第三种是在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  中振荡, 在  $\text{AlN}$  和  $\text{GaN}$  中呈指数衰减 (记为 HS3), 即要求  $\varepsilon_{1,\perp}\varepsilon_{1,z} < 0$ ,  $\varepsilon_{2,\perp}\varepsilon_{2,z} > 0$ ,  $\varepsilon_{3,\perp}\varepsilon_{3,z} > 0$ . 计算还表明, 该体系中不存在在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  中呈指数衰减、在  $\text{AlN}$  和  $\text{GaN}$  中振荡的 HS 声子模.

将上述三类 HS 声子模分别结合附加边界条件  $\phi_{\text{HS},1}(q, z)|_{z \rightarrow -\infty} = 0$ ,  $\phi_{\text{HS},3}(q, z)|_{z \rightarrow +\infty} = 0$ , 可解得相应的色散关系分别满足  $M_{12} + M_{22} = 0$ ,  $M_{21} + M_{22} = 0$ ,  $M_{21} + M_{22} = 0$ .

HS1, HS2 和 HS3 存在的频率范围分别为  $\omega \in (\omega_{3,z1}, \omega_{3,\perp1})$ ,  $\omega \in (\omega_{zta}, \omega_{\perp ta})$ ,  $\omega \in (\omega_{1,z1}, \omega_{1,\perp1})$ . 本文仅就  $q = 1.5 \text{ nm}^{-1}$ ,  $x = 0.3$ , 分别给出  $m = 1, 2, 3, 4$  时三种 HS 声子势 (图 4).

如图 4(a) 所示, HS1 声子势在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  和  $\text{AlN}$  (即  $0 < z < z_2$ ) 中几乎衰减为零, 但在  $\text{GaN}$  中呈现振荡形式, 随着  $m$  的增大波幅逐渐减小. 在两个波节范围内 ( $8 \text{ nm} < z < 16 \text{ nm}$ ), 不同  $m$  的振荡波对于两个波节范围的中心具有确定的对称性 ( $m = 1, 3$  时对称,  $m = 2, 4$  时反对称).

HS2 声子势在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  层和  $\text{AlN}$  层中分别形成振幅不同的振荡波, 在  $\text{GaN}$  中呈指数衰减. 随着  $x$  的增加, 振荡波的波幅逐渐增大 (图 4(b)).

图 4(c) 显示, HS3 声子势在  $\text{AlN}/\text{GaN}$  界面处达到峰值, 并在  $\text{AlN}$  层和  $\text{GaN}$  层中呈指数衰减, 而在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  层中振荡. 随着  $\text{Al}$  组分的增加, 振荡波幅以及在  $\text{AlN}/\text{GaN}$  界面处的峰值逐渐增大.

需要指出的是, 在本文所讨论的体系中不存在呈现振荡的传播 (PR) 声子模.

### 3.3 电子迁移率的尺寸效应

为了与实验结果比较, 本文取材料温度为 300 K, 电子面密度为  $0.844 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  势垒层厚度为 20 nm,  $\text{GaN}$  层为 2  $\mu\text{m}$ , 得到界面声子 (IO2) 和第一类 HS 声子 (HS1) 散射下电子迁移率随  $\text{AlN}$  插入层厚度的变化关系 (图 5). 数值计算结果显示: 在 IO1, CO, HS2, HS3

声子散射下, 电子迁移率至少要高于 IO2 和 HS1 声子散射下的迁移率两个数量级, 故后者对总迁移率  $\mu_T$  的贡献可忽略不计. 还可看出, 随着  $\text{AlN}$  插入层厚度的增加, 由于 IO2 声子的散射, 电子迁移率逐渐下降, 而 HS1 声子的散射致使迁移率逐渐增大. 这是由于  $\text{AlN}$  层厚度的增加会使  $\text{GaN}$  中内建电场增大, 导致局域在  $\text{AlN}/\text{GaN}$  界面势阱中的二维电子越来越靠近界面, 故 IO2 声子对电子的散射逐渐增强, 而 HS1 声子的散射则逐渐减弱, 前者对总迁移率的贡献起主要作用. 因此, 总迁移率随着  $\text{AlN}$  层厚度的增加而逐渐减小. Tülek 等 [11] 测得室温下当电子面密度为  $0.844 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  时  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  (20 nm) /  $\text{AlN}$ (1.2 nm) /  $\text{GaN}$ (2  $\mu\text{m}$ ) 异质结构中电子的迁移率为  $1700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ . 本文对该体系电子迁移率的理论计算结果为  $1885 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ , 高于实验值 11% 左右. 这个差别主要归因于数值计算时忽略了界面粗糙度以及声学声子等次要散射对电子迁移率的影响.

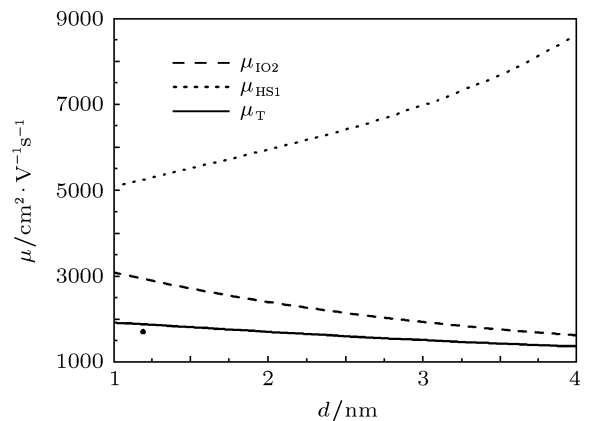


图 5 纤锌矿  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$  异质结构中界面声子和 HS 声子散射下电子迁移率随  $\text{AlN}$  插入层厚度的变化. 实心圆点为文献 [11] 中的实验值

### 3.4 电子迁移率的三元混晶效应

为了强调电子迁移率的三元混晶效应和界面效应, 我们选取  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  势垒层,  $\text{AlN}$  插入层和  $\text{GaN}$  层的厚度分别为 20, 1.2 nm 和 2  $\mu\text{m}$ , 取温度为 300 K, 电子面密度为  $0.844 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  进行计算. 图 6 给出了 IO2 和 HS1 声子散射下电子迁移率随  $\text{Al}$  组分的变化. 因  $\text{Al}$  组分  $x > 0.436$  时的声子模式将发生转变, 故图 6 仅给出  $x < 0.436$  时的情形. 从图 6 可以看出, IO2 声子的散射随着  $\text{Al}$  组分的增加而逐渐增强, 而 HS1 声子的散射

则逐渐减弱. 造成以上结果主要有三方面的原因. 第一, Al 组分的增加不仅调制 AlGa<sub>x</sub>N 势垒层中的静态介电常数, 而且还调制该层以及其他层的自发极化和压电极化等, 导致 GaN 中内建电场  $F_3$  逐渐增强, 使得界面势阱中 2DEG 逐渐向界面靠近. 第二, Al 组分的增加会导致 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 势垒高度增加, 但由于 AlN 插入层的隔离作用, Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 势垒高度的增加不会对界面处 2DEG 的分布造成很大影响. 第三, 界面声子的频率也逐渐增大, 从而对电子的散射增强. 以上三方面的综合作用使得 2DEG 逐渐向 AlN/GaN 界面靠近, 导致界面声子 (IO2) 对电子的散射逐渐增强, HS 声子 (HS1) 对电子的作用则减弱, 前者对总迁移率起主要作用, 综合效果是总迁移率随着 Al 组分的增加而逐渐下降.

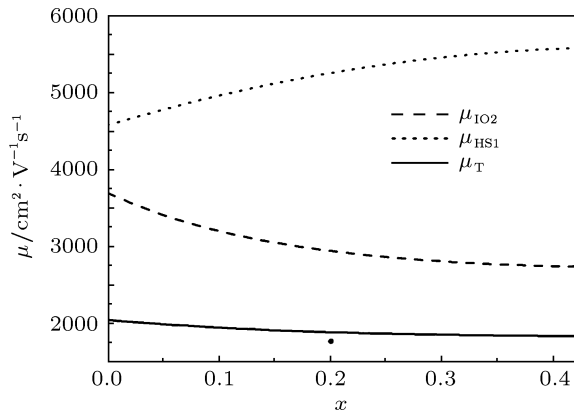


图6 在纤锌矿 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N(20 nm)/AlN(1.2 nm)/GaN(2 μm) 异质结构中, 界面声子和 HS 声子散射下电子迁移率随 Al 组分的变化 实心圆点为文献 [11] 中的实验值

## 4 结论

由于 AlN 插入层而导致的异质结构中新界面的出现以及体系的不对称性, 导致体系光学声子模的色散关系和静电势分布的三元混晶效应表现出较 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN 单异质和对称体系更为复杂的形态. 具体表现为同种类型界面光学声子的色散频率随着波数的增大而趋近于两个极值, 并且两个极值差随着 Al 组分的增大而逐渐增大. 而在对称的体系 (如 GaN/AlN/GaN) 当中, 同种类型的界面光学声子的色散频率则趋于同一极值. 此外, 各种类型光学声子静电势分布的对称性、峰值以及振荡波幅也随着 Al 组分的变化而发生改变. 随着 AlN 插入层厚度的增加和 Al 组分的升高, 2DEG 的浓度逐

渐升高, 而电子的总迁移率则由于界面光学声子的散射而呈现下降趋势. 适当调整 Al 组分和 AlN 插入层的厚度, 能够使基于 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构的光电子器件性能得到优化.

## 附录 A 内建电场强度的计算

Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN 异质结构中的内建电场强度可表示为<sup>[31]</sup>

$$F_i = \frac{\sum_j d_j (P_j - P_i) / \epsilon_j^s}{\epsilon_i^s \sum_j d_j / \epsilon_j^s} \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (\text{A1})$$

这里,  $d_j$  为第  $j$  层材料的厚度;  $P_j$  为该层界面两侧极化强度之差, 其中包括自发极化  $P_j^{\text{sp}}$  和压电极化  $P_j^{\text{pz}}$ , 即  $P_j = P_j^{\text{sp}} + P_j^{\text{pz}}$ ;  $\epsilon_j^s$  为该层材料的静态介电常数. 由于自发极化和材料本身的性质有关, 故三元混晶 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N 势垒层中的自发极化可由二元化合物 AlN 和 GaN 的自发极化线性插值得到, 而压电极化是由界面晶格失配产生的应变所致, 通常表示为<sup>[31]</sup>

$$P_j^{\text{pz}} = 2e_{31,j} \kappa_{xx,j} + e_{33,j} \kappa_{zz,j}. \quad (\text{A2})$$

其中,  $e_{31,j}$  和  $e_{33,j}$  均为压电常数,  $\kappa_{xx,j}$  和  $\kappa_{zz,j}$  为应变张量矩阵元, 可表为

$$\kappa_{xx,j} = \frac{a_0 - a_j}{a_j}. \quad (\text{A3})$$

这里,  $a_0$  和  $a_j$  分别为体系平衡晶格常数和第  $j$  层材料的自由晶格常数, 若体系以纤锌矿氮化物作为缓冲层, 则有  $a_0 \approx a_{\text{buff}}$ <sup>[31]</sup>; 而  $\kappa_{zz,j}$  可表示为<sup>[32]</sup>

$$\kappa_{zz,j} = \kappa_{xx,j} \frac{C_{11,j} + C_{12,j} - 2C_{13,j}}{C_{33,j} - C_{13,j}}. \quad (\text{A4})$$

其中  $C_{11,j}$ ,  $C_{12,j}$ ,  $C_{13,j}$  和  $C_{33,j}$  为弹性常数.

## 附录 B 光学声子模的色散关系以及声子势的计算

介电连续模型的边界条件要求电场  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  沿切线方向连续, 电位移  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$  沿  $z$  方向连续<sup>[20]</sup>, 即

$$\phi_{\lambda,j}(q, z)|_{z=z_j} = \phi_{\lambda,j+1}(q, z)|_{z=z_j}, \quad (\text{B1})$$

$$\begin{aligned} & -\epsilon_{j,z} \frac{\partial \phi_{\lambda,j}(q, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_j} \\ & = -\epsilon_{j+1,z} \frac{\partial \phi_{\lambda,j+1}(q, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_j}. \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

将 (B1), (B2) 两式写成矩阵形式为

$$\mathbf{M}_{j+1}(z_j) \mathbf{C}_{j+1} = \mathbf{M}_j(z_j) \mathbf{C}_j, \quad (\text{B3})$$

其中  $M_j(z_j)$  和  $C_j$  应分别满足<sup>[30]</sup>

$$M_j(z) = \begin{pmatrix} \exp(ik_j z) & \exp(-ik_j z) \\ \varepsilon_{j,z} \frac{\partial \exp(ik_j z)}{\partial z} & \varepsilon_{j,z} \frac{\partial \exp(-ik_j z)}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (\text{B4})$$

$$C_j = \begin{pmatrix} c_{j+} \\ c_{j-} \end{pmatrix}, \quad (\text{B5})$$

对于本文所研究的体系, 结合文献 [30] 中的递推规则, 可得转移矩阵

$$M = M_3(z_2)^{-1} M_2(z_2) M_2(z_1)^{-1} M_1(z_1), \quad (\text{B6})$$

其中  $M$  为  $2 \times 2$  矩阵. 对于纤锌矿  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{AlN}/\text{GaN}$  异质结构, 可能存在 IO, CO, HS 和 PR 等光学声子模. 结合附加边界条件, 光学声子模的色散关系可归结为转移矩

阵  $M$  中矩阵元之间满足的方程, 我们在本文中已给出其具体形式.

由光学声子模的色散关系解得相应的声子频率, 再利用转移矩阵  $M$  并结合光学声子势的归一化方程解得  $c_{j+}$  和  $c_{j-}$ , 最后依据 (12) 式即可得到相应的声子势. 光学声子势的归一化方程为<sup>[20,30]</sup>

$$\frac{\hbar}{2\omega} = \sum_j \frac{\varepsilon_0}{2\omega} \int_{R_j} dz \left[ q^2 \frac{\partial \varepsilon_{j,\pm}(\omega)}{\partial \omega} |\phi_{\lambda,j}(q,z)|^2 + \frac{\partial \varepsilon_{j,z}(\omega)}{\partial \omega} \left| \frac{\partial \phi_{\lambda,j}(q,z)}{\partial z} \right|^2 \right], \quad (\text{B7})$$

其中  $R_j$  表示异质结体系材料的各个区域. 在我们所考虑的异质结体系中, 2DEG 主要分布在 AlN/GaN 界面处, 故可忽略衬底声子模对电子的影响.

- [1] Gaska R, Shur M S, Bykhovski A D, Orlov A O, Snider G L 1999 *Appl. Phys. Lett.* **74** 287
- [2] Smorchkova I P, Elsass C R, Ibbetson J P, Vetryu R, Heying B, Fini P, Haus E, DenBaars S P, Speck J S, Mishra U K 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 4520
- [3] Tao Y Q, Chen D J, Kong Y C, Shen B, Xie Z L, Han P, Zhang R, Zheng Y D 2006 *J. Electron. Mater.* **35** 722
- [4] Hsu L, Walukiewicz W 1997 *Phys. Rev. B* **56** 1520
- [5] Gaska R, Yang J W, Osingsky A, Chen Q, Khan M A, Orlov A O, Snider G L, Shur M S 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 707
- [6] Gurusinge MN, Davidsson S K, Andersson T G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045316
- [7] Shen L, Heikman S, Moran B, Coffie, Zhang N D, Buttari D, Smorchkova I P, Keller S, DenBaars S P, Mishra U K 2001 *IEEE Electron Dev. Lett.* **22** 457
- [8] Hsu L, Walukiewicz W 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 1783
- [9] 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
- [10] Miyoshi M, Ishikawa H, Egawa T, Asai K, Mouri M, Shibata T, Tanaka M, Oda O 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1710
- [11] 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
- [12] Miyoshi M, Egawa T, Ishikawa H 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 63713
- [13] Lee B C, Kim K W, Stroschio M A, Dutta M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4860
- [14] Komirenko S M, Kim K W, Stroschio M A, Dutta M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 2034
- [15] Qu Y, Ban S L 2009 *Eur. Phys. J. B* **69** 321
- [16] Qu Y, Ban S L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4863 (in Chinese) [屈媛, 班士良 2010 物理学报 **59** 4863]
- [17] Qu Y, Ban S L 2011 *J. Appl. Phys.* **110** 013722
- [18] Chu R M, Zhou Y G, Zheng Y D, Han P, Shen B, Gu S L 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2270
- [19] Li J M, Lü Y W, Li D B, Han X X, Zhu Q S, Liu X L, Wang Z G 2004 *J. Vac. Sci. Technol. B* **22** 2568
- [20] Lü J T, Cao J C 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 033502
- [21] Hayers W, Loudon R 1964 *Scattering of Light by Crystals* (New York: Wiley) p169
- [22] Yu S G, Kim K W, Bergman L, Dutta M, Stroschio M A, Zavada J M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 15283
- [23] Holtz M, Prokofyeva T, Seon M, Copeland K, Vanbuskirk J, Williams S, Nikishin S A, Tretyakov V, Temkin H 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 7977
- [24] Wang X F, da Cunha Lima I C, Lei X L 1998 *Phys. Rev. B* **58** 12609
- [25] Bungaro C, Rapcewicz K, Bernholc J 2000 *Phys. Rev. B* **61** 6720
- [26] Demangeot F, Groenen J, Frandon J, Renucci M A, Briot O, Clur S, Aulombard R L 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 2674
- [27] Wu J 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 011101
- [28] Zoroddu A, Bernardini F, Ruggerone P, Fiorentini V 2001 *Phys. Rev. B* **64** 045208
- [29] Vurgaftman I, Meyer J R 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 3675
- [30] Yu S G, Kim K W, Stroschio M A, Iafate G J, Sun J P, Hsddd G I 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 3363
- [31] Lepkowski S P, Teisseyre H, Suski T, Perlin P, Grandjean N, Massies J 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 1483
- [32] Wagner J M, Bechstedt F 2002 *Phys. Rev. B* **66** 115202

# Influence of optical-phonon scattering on electron mobility in wurtzite AlGa<sub>x</sub>N/AlN/GaN heterostructures\*

Yang Fu-Jun Ban Shi-Liang<sup>†</sup>

(School of Physical Science and Technology, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)

(Received 20 April 2011; revised manuscript received 1 November 2011)

## Abstract

Adopting a numerical method of solving self-consistently the Schrödinger equation and Poisson equation through taking into account the realistic heterostructure potential, which includes the influences of energy band bending and the finite thickness of barriers, and through considering the built-in electric field induced by spontaneous and piezoelectric polarization, the eigenstates and eigenenergies of electrons in two-dimensional electron gas (2DEG) are obtained for wurtzite Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/AlN/GaN heterostructures with an inserted AlN layer. Based on the continuous dielectric model and the Loudon's uniaxial crystal model, optical-phonon modes and their ternary mixed crystals effect are discussed using the transfer matrix method. Furthermore, the Lei-Ting balance equation is extended in order to investigate the distribution of 2DEG and its size effect as well as ternary mixed crystals effect on electron mobility, which under the influence of each branch of optical-phonon modes are analyzed at room temperature. The results show that the increases of the thickness of inserted AlN layer and the Al component of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N in the barrier enhance the built-in electric field in the GaN layer, leading 2DEG to be much closer to the interface of a heterostructure. In addition, it can also be found that the scattering from the interface phonons is stronger than from other optical-phonons, the interface phonons play a dominant role in the total mobility. A higher electron mobility can be obtained by adjusting appropriately the thickness of inserted AlN layer and Al component.

**Keywords:** AlGa<sub>x</sub>N /AlN/GaN heterostructure, electron mobility, optical-phonon mode, ternary mixed crystal effect

**PACS:** 72.10.-d, 63.20.kd, 72.80.Ey, 73.21.Ac

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60966001), the Key Program of Natural Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region, China (Grant No. 20080404Zd02), and the Specialized Research Foundation for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20070126001).

<sup>†</sup> E-mail: slban@imu.edu.cn