

AlGa_xN/GaN 异质结构中极化与势垒层掺杂对二维电子气的影响*

孔月婵[†] 郑有 周春红 邓永桢 顾书林 沈波 张荣 韩平 江若琏 施毅

(南京大学物理系, 南京 210093)

(2003 年 10 月 13 日收到 2003 年 11 月 12 日收到修改稿)

从 III 族氮化物中压电极化对应变弛豫度的依赖关系出发, 通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 分别研究了自发极化、压电极化和 AlGa_xN 势垒层掺杂对 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构二维电子气的浓度、分布、面密度以及子带分布等性质的影响. 结果表明, 二维电子气性质强烈依赖于极化效应. 不考虑 AlGa_xN 势垒层掺杂, 当 Al 组分为 0.3 时, 由极化导致的二维电子气浓度达 $1.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 其中压电极化对二维电子气贡献为 $0.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 略小于自发极化的贡献 ($0.9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$), 但为同一数量级, 因而通过控制 AlGa_xN 层应变而改变极化对于提高二维电子气浓度至关重要. AlGa_xN 势垒层掺杂对二维电子气的影响较弱, 当掺杂浓度从 1×10^{17} 增加到 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, 二维电子气面密度增加 $0.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

关键词: Al_xGa_{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

近年来, III 族氮化物 AlGa_xN/GaN 异质结构效应晶体管已成为当前研究的热点^[1-3]. AlGa_xN/GaN 异质结构具有很强的极化效应, 这使其作为高浓度二维电子气体, 即使在未掺杂时, 也可获得高达 10^{13} cm^{-2} 面密度的二维电子气^[4,5], 从而是发展微波频段高压、高功率器件的理想结构材料. 其中二维电子气浓度是影响器件性能的一个重要因素. 如何提高二维电子气浓度是提高和优化器件电学性能的关键所在, 因而研究二维电子气与哪些因素有关显得尤为重要. 极化效应是 III 族氮化物的一个突出性质, 由于 AlN 和 GaN 较大的压电系数, 以及二者间大晶格失配所导致的压电极化, 以及材料本身具有的很强的自发极化, 在 AlGa_xN/GaN 异质结构中产生一个很强的极化电场, 成为感生高浓度二维电子气的主要原因之一^[6,7]. 尽管如此, 关于极化如何受势垒层应变弛豫度影响从而改变二维电子气性质还少有报道, 而实际上, 应变弛豫是影响材料生长质量和器件性

能的重要因素. 此外, AlGa_xN 势垒层非故意掺杂也是二维电子气的重要来源之一^[8].

本文从引入 AlGa_xN 势垒层应变弛豫度 R 以区分自发极化和压电极化出发, 通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 对 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构中二维电子气性质进行研究, 讨论了二维电子气浓度、面密度以及子带分布分别对压电极化、自发极化和 AlGa_xN 势垒层掺杂的依赖关系. 这对于通过控制二维电子气浓度从而提高器件性能有重要意义.

2. Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构模型与计算

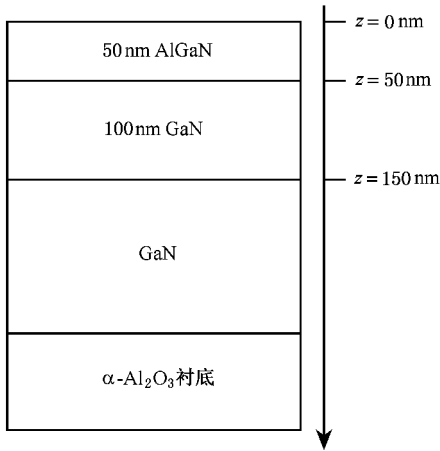
AlGa_xN/GaN 异质结构图如图 1 所示. AlGa_xN 势垒层厚度为 50nm, GaN 层厚度为 100nm, 并假定完全弛豫. 相对于二维电子气浓度, GaN 层的背景载流子浓度很小, 可忽略不计.

Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质界面为理想突变界面, 考虑极化效应, 界面处边界条件为

$$\epsilon_1 E_1 + P_1 = \epsilon_2 E_2, \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 60136020, 60276031 和 60290080), 国家重点基础研究专项基金(批准号: G20000683)和国家高技术研究发展计划(批准号: 2002AA305304)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: dg0222086@ymail.nju.edu.cn

图1 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构示意图

其中 ϵ_1 和 ϵ_2 , E_1 和 E_2 分别为 AlGa_xN 和 GaN 层的介电常数和界面处电场强度, P_1 为界面两侧极化强度之差, 包括自发极化 P_{SP} 和压电极化 P_{PE} , 即 $P_1 = P_{SP} + P_{PE}$. Al_xGa_{1-x}N 势垒层中自发极化为材料本身的性质, 与 Al 组分 x 有关; 压电极化是由 AlGa_xN 和 GaN 之间晶格不匹配引起^[5]:

$$P_{PE} = (1 - R) \times \frac{\alpha(0) - a_0(x)}{a_0(x)} \times \left(e_{31}(x) - e_{33}(x) \frac{C_{13}(x)}{C_{33}(x)} \right), \quad (2)$$

其中 R 为 AlGa_xN 层应变弛豫度, a 和 a_0 分别为 Al_xGa_{1-x}N 应变晶格常数和本征晶格常数, e_{31} 和 e_{33} , C_{13} 和 C_{33} 分别为 AlGa_xN 材料的压电常数和弹性常数. 表 1 列出计算中使用的参数, 包括 AlN 和 GaN 材料的自发极化强度、晶格常数、压电常数、弹性常数、介电常数以及电子有效质量. 计算中 AlGa_xN 势垒层参数为 AlN 和 GaN 二者参数的线性组合.

表 1 AlN 和 GaN 的自发极化强度、晶格常数、压电常数、弹性常数、介电常数以及电子有效质量

纤锌矿	AlN	GaN
$P_{SP}/(C/m^2)$	-0.081 ^{a)}	-0.029 ^{a)}
a_0/nm	0.3112 ^{a)}	0.3189 ^{a)}
$e_{31}/(C/m^2)$	-0.60 ^{a)}	-0.49 ^{a)}
$e_{33}/(C/m^2)$	1.46 ^{a)}	0.73 ^{a)}
C_{13}/GPa	108 ^{b)}	103 ^{b)}
C_{33}/GPa	373 ^{b)}	405 ^{b)}
ϵ	8.5 ^{c)}	10 ^{c)}
$m^*(m_0)$	0.48 ^{c)}	0.2 ^{d)}

a) 为文献 [5] b) 为文献 [9] c) 为文献 [10] d) 为文献 [7].

应变弛豫度 R 对极化的影响如下: Al_xGa_{1-x}N 势垒层自发极化 P_{SP} 不随应变弛豫度变化, 仅与 Al 组分 x 有关; 由方程 (2) 可知, 当 Al 组分一定时, 压电极化仅与 AlGa_xN 势垒层的应变弛豫度 R 有关, 当 $R = 0$ 时, AlGa_xN 为完全应变, 压电极化 $|P_{PE}|$ 为最大值, 此时二维电子气由自发极化和压电极化两部分贡献; 当 $R = 1$ 时, AlGa_xN 完全弛豫, 压电极化 $P_{PE} = 0$, 二维电子气只由自发极化贡献. 因而在计算中以应变弛豫度 R 区分自发极化与压电极化, 以分别讨论二者对二维电子气的影响.

基于以上模型, 我们对薛定谔方程和泊松方程进行自洽求解. 一维单电子薛定谔方程可写为

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi_i(z) + \frac{2m^*}{\hbar^2} [E_i - V(z)] \psi_i(z) = 0, \quad (3)$$

m^* 为电子有效质量, \hbar 为普朗克常数, E_i 和 ψ_i 分别为第 i 个子带的能量和波函数, V 为导带底能量.

一维泊松方程为

$$\frac{d^2}{dz^2} V(z) = -\frac{\rho(z)}{\epsilon(z)}, \quad (4)$$

其中 ρ 为总电荷密度, ϵ 为介电常数. 总电荷密度 ρ 由下式给出^[11]:

$$\rho(z) = q \left(N_d^+ - N_a^- - n + p - \sum_i n_i \psi_i^*(z) \psi_i(z) \right), \quad (5)$$

其中 N_d^+ 和 N_a^- 分别为离化的施主和受主电荷浓度, n 和 p 分别为自由载流子浓度, 等号右边最后一项为对子带填充电子求和, 其中 n_i 为^[11]

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_i}{k_B T} \right) \right], \quad (6)$$

k_B 为玻尔兹曼常数. 由于受主杂质浓度和空穴浓度很低, 计算中不考虑两者对总电荷密度的贡献.

通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程^[12], 得到 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构中二维电子气的分布、面密度以及子带分布等性质, 分析了自发极化、压电极化和 AlGa_xN 势垒层掺杂对二维电子气的影响. 计算中设温度 $T = 300K$, 表面势垒高度为 1.42eV. 靠近衬底的导带底能量设为能量零点.

3. 结果与讨论

首先计算 Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN 异质结构中自发极化与压电极化对二维电子气的影响, 假定 AlGa_xN 势垒层未掺杂.

图 2 为考虑压电极化 ($R = 0$) 和未考虑压电极

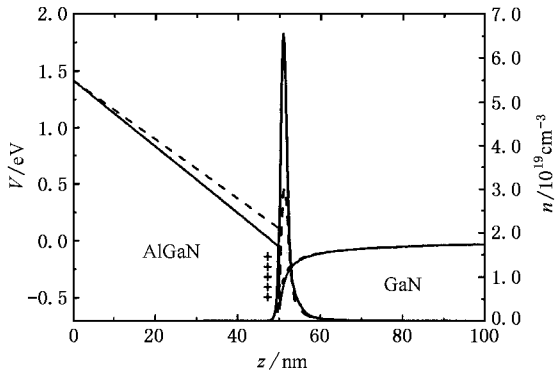


图2 考虑压电极化($R=0$)和未考虑压电极化($R=1$) ,仅有自发极化 对 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 二维电子气分布与导带图 ——为 $R=0$, - - - 为 $R=1$

化($R=1$)时, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气分布和导带能量图.由图2可知,未考虑压电极化和考虑压电极化的二维电子气峰值浓度分别为 3×10^{19} 和 $6.55 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,后者为前者的两倍之多.这是因为考虑压电极化时,在 AlGaN/GaN 异质界面处极化不连续性增大,从而在界面附近 AlGaN 层中感生附加的正极化电荷,导致量子阱变深.如图2所示,考虑和未考虑压电极化时,阱深分别为 -0.59 和 -0.45eV .由于阱变深导致量子限制作用增强,使二维电子气浓度增大.由图2还可得到,考虑和未考虑压电极化时,二维电子气的峰值浓度分别位于 $z=51\text{nm}$ 和 $z=51.4\text{nm}$ 处.这是由于压电极化导致界面处极化电荷密度增大,极化电场增强,从而吸引二维电子气更加靠近异质界面.

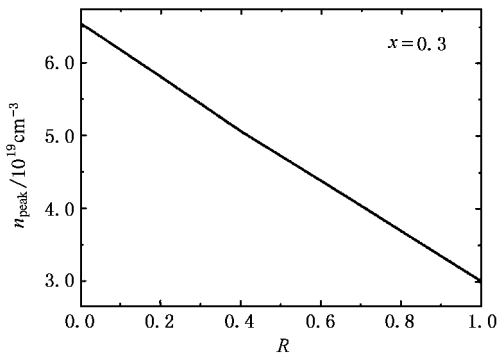


图3 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气峰值浓度 n_{peak} 随应变弛豫度 R 的变化关系

为了进一步明确二维电子气浓度随压电极化的变化关系,由压电极化与应变弛豫度 R 线性相关,给出二维电子气峰值浓度 n_{peak} 随应变弛豫度 R 的

变化情况,如图3所示.由图3可以看出,随应变弛豫度的增加,根据方程(2),由于压电极化线性减小,二维电子气峰值浓度以近线性的方式减小.

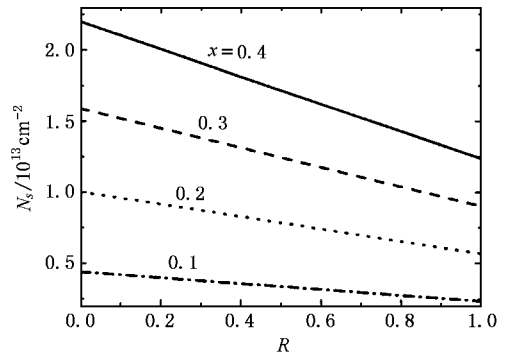


图4 不同 Al 组分时二维电子气面密度 N_s 与应变弛豫度 R 的变化关系

为了比较压电极化和自发极化对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气的贡献,计算了二维电子气面密度 N_s 随 AlGaN 应变弛豫度 R 的变化关系.图4为不同 Al 组分时, N_s 与 R 的关系.由图4可以估算自发极化和压电极化对二维电子气的贡献大小.当 Al 组分为 0.3 时,由自发极化($R=1$)导致的二维电子气面密度为 $0.9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$,考虑压电极化后($R=0$),二维电子气面密度为 $1.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$,因而可以得到,压电极化对二维电子气面密度贡献约为 $0.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$,即自发极化对二维电子气的贡献高于压电极化的贡献,但为同一数量级.比较 Al 组分 $x=0.1, 0.2$ 和 0.4 的情况,可以得到同样的结论.由图4还可以看出,当 Al 组分增大时,二维电子气面密度随弛豫度增加而减小得更快,这是由于随 Al 组分增大,压电极化增强,对二维电子气面密度贡献随之增大.

图5为不同应变弛豫度时, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中二维电子气的子带分布图.由图5可以看出,当应变弛豫度 R 增加时,分布在每一个子带中的二维电子气面密度均显著减小,考虑压电极化($R=0$)和未考虑压电极化($R=1$),即 AlGaN 势垒层从完全应变到完全弛豫,第一子带中的二维电子气面密度的峰值从 1.3×10^{12} 减小到 $5.9 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$,减小至 $1/2$ 强,变化趋势与图2情况一致.由图5可以看出,在第二、三子带中的二维电子气受应变弛豫度影响相同,随弛豫度增加,二维电子气减小,且分布变宽.

最后考虑了 AlGaN 势垒层掺杂对 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/$

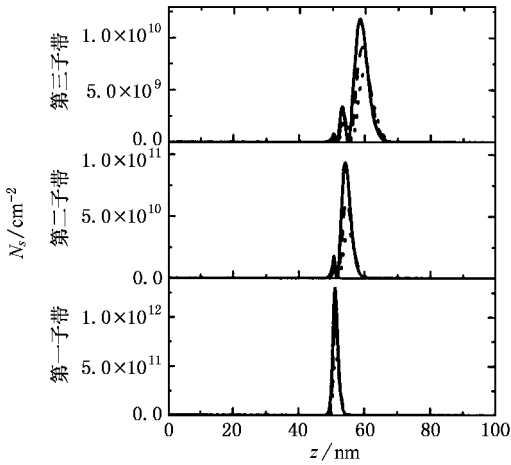


图5 应变弛豫度 R 分别为 0 (——) 0.5 (---) 和 1 (.....) 时 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$ 二维电子气子带分布图

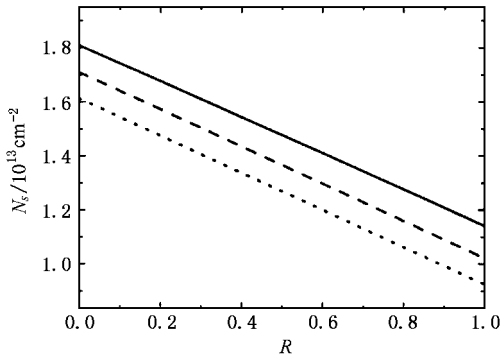


图6 AlGa_{0.3}N/GaN 势垒层掺杂浓度分别为 $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (.....), $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (---) 和 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (——) 时, 二维电子气面密度 N_s 随应变弛豫度 R 的变化关系

GaN 二维电子气的影响. 图 6 为不同势垒层掺杂时, 二维电子气面密度 N_s 与应变弛豫度 R 的变化关系. 由图 6 可以看出, 当 AlGa_{0.3}N 势垒层掺杂浓度分别为 $N_d = 1 \times 10^{17}$, 5×10^{17} 和 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, 二维电子气面密度均随弛豫度的增加而线性减小, 且线性减小的趋势不随掺杂浓度改变而改变, 这说明掺杂对二维电子气的贡献是一定的. 当掺杂浓度从 1×10^{17} 增加到 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, 二维电子气面密度约增加 $0.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 因而与极化相比, AlGa_{0.3}N 势垒层掺杂对二维电子气贡献较小.

4. 结 论

本文利用应变弛豫度区分自发极化与压电极化, 通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程, 分别研究了自发极化、压电极化和 AlGa_{0.3}N/GaN 势垒层掺杂对 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构中二维电子气分布、面密度和子带分布的影响. 结果表明, 自发极化和压电极化强烈影响二维电子气性质, 当 Al 组分 $x = 0.3$ 时, 不考虑 AlGa_{0.3}N 势垒层掺杂, 当 AlGa_{0.3}N 完全应变 ($R = 0$), 二维电子气面密度为 $1.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 其中由自发极化 ($R = 1$, 即 AlGa_{0.3}N 完全弛豫) 和压电极化贡献的二维电子气面密度分别为 0.9×10^{13} 和 $0.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 二者对二维电子气面密度的贡献为同一数量级, 其中自发极化的贡献较强于压电极化. AlGa_{0.3}N 势垒层掺杂对二维电子气的影响较小, 当掺杂浓度 N_d 从 1×10^{17} 增加到 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, 二维电子气面密度增加 $0.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

[1] Jogai B 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 1631
 [2] Chu R M, Zheng Y D, Zhou Y G, Gu S L, Shen B and Zhang R 2003 *Opt. Mater.* **23** 207
 [3] Jiang C P, Guo S L, Huang Z M, Yu J, Gui Y S, Zheng G Z, Chu J H, Zheng Z W, Shen B and Zheng Y D 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 374
 [4] Antoszewski J, Gracey M, Dell J M, Faraone L, Fisher T A, Parish G, Wu Y F and Mishra U K 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 3900
 [5] 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
 [6] Oberhuber R, Zandler G and Vogl P 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 818

[7] Maeda N, Nishida T, Kobayashi N and Tomizawa M 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 1856
 [8] Hsu L and Walukiewicz W 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 339
 [9] 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 and Hilsenbeck J 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 3222
 [10] Chin V W L, Tansley T L and Osotchan T 1994 *J. Appl. Phys.* **75** 7365
 [11] Zhang Y and Singh J 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 587
 [12] Kong Y C, Zheng Y D, Chu R M and Gu S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1756 (in Chinese) [孔月婵、郑有、储荣明、顾书林 2003 物理学报 **52** 1756]

Influence of polarizations and doping in AlGa_xN barrier on the two-dimensional electron-gas in AlGa_xN/GaN heterostructure^{*}

Kong Yue-Chan[†] Zheng You-Dou Zhou Chun-Hong Deng Yong-Zhen
Gu Shu-Lin Shen Bo Zhang Rong Han Ping Jiang Ruo-Lian Shi Yi
(Department of Physics , Nanjing University , Nanjing 210093 , China)
(Received 13 October 2003 ; revised manuscript received 12 November 2003)

Abstract

The two-dimensional electron-gas (2DEG) distribution , sheet density and subband occupations in Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructure are calculated by solving the coupled Schrödinger and Poisson equations self-consistently. By involving degree of relaxation to distinguish the spontaneous and piezoelectric polarizations , the influence of the polarizations and the doping in the AlGa_xN barrier on the 2DEG properties are investigated separately. It is found that the 2DEG properties depend much stronger on the polarizations than on the doping , and that the contribution of the spontaneous polarization is dominant. The 2DEG sheet density is calculated to be $1.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ with an Al-content of $x = 0.3$ in the strained AlGa_xN barrier , the contributions of spontaneous and piezoelectric polarizations are 0.9×10^{13} and $0.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ respectively. When the doping of the AlGa_xN barrier is increased from 1×10^{17} to $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, the 2DEG sheet density is increased by $0.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

Keywords : Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructure , two-dimensional electron-gas , spontaneous polarization , piezoelectric polarization

PACC : 7280E , 7340L , 7320D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60136020 , 60276031 and 60290080) , the Special Foundation for State Major Basic Research Program of China (Grant No. G20000683) , and the National High Technology Development Program of China (Grant No. 2002AA305304) .

[†] Corresponding author. E-mail : dg0222086@ymai.nju.edu.cn