

AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结电子输运机制*

周展辉 李群† 贺小敏‡

(西安理工大学自动化与信息工程学院, 西安 710048)

(2022 年 7 月 29 日收到; 2022 年 9 月 28 日收到修改稿)

β -Ga₂O₃ 具有禁带宽度大、击穿电场强的优点, 在射频及功率器件领域具有广阔的应用前景. β -Ga₂O₃ (201) 晶面和 AlN (0002) 晶面较小的晶格失配和较大的导带阶表明二者具有结合为异质结并形成二维电子气 (two-dimensional electron gas, 2DEG) 的理论基础, 引起了众多研究者关注. 本文利用 AlN 的表面态假设, 通过求解薛定谔-泊松方程组计算了 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结导带形状和 2DEG 面密度, 并将结果应用于玻尔兹曼输运理论, 计算了离化杂质散射、界面粗糙散射、声学形变势散射、极性光学声子散射等主要散射机制限制的迁移率, 评估了不同散射机制的相对重要性. 结果表明, 2DEG 面密度随 AlN 厚度的增加而增加, 当 AlN 厚度为 6 nm, 2DEG 面密度可达 $1.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 室温迁移率为 $368.6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 在 $T < 184 \text{ K}$ 的中低温区域, 界面粗糙散射是限制 2DEG 迁移率的主导散射机制, $T > 184 \text{ K}$ 的温度区间, 极性光学声子散射是限制 2DEG 迁移率的主导散射机制.

关键词: AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结, 二维电子气, 电子输运, 迁移率

PACS: 85.30.De, 85.25.-j, 74.78.Fk, 72.10.-d

DOI: 10.7498/aps.72.20221545

1 引言

早在 20 世纪 50 年代, 科学家们已经就 Ga₂O₃ 材料开展相关研究, 在目前已知的 Ga₂O₃ 五种同素异形体中, 单斜晶系的 β -Ga₂O₃ 是一种超宽禁带的透明氧化物半导体, 化学性质最为稳定, 在最近 10 年得到了快速发展^[1-3]. β -Ga₂O₃ 具有比传统宽禁带半导体如 SiC 和 GaN 更大的禁带宽度 (4.9 eV) 和更高的击穿电场 (8 MV/cm)^[4-5], 电子饱和速度高达 $2 \times 10^7 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ ^[6], 这些突出的材料特性使 β -Ga₂O₃ 在大功率、高频电子器件和深紫外光电器件领域具有很大的应用潜力. 另外, β -Ga₂O₃ 可以用熔体生长法制备大尺寸单晶, 也可以用分子束外延、脉冲激光沉积、金属有机化学气相沉积等多种

方法制备高质量外延薄膜^[2,7-8], 为 β -Ga₂O₃ 的大规模应用提供了条件.

β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ 合金的禁带宽度在 4.9—8.8 eV 范围内可调, 可以通过外延生长将 β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ 和 β -Ga₂O₃ 集成为 β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃/Ga₂O₃ (β -AGO/GO) 异质结, 在界面处形成二维电子气 (two-dimensional electron gas, 2DEG), 能够应用于高电子迁移率晶体管 (high electron mobility transistor, HEMT) 器件^[9-11]. β -AGO/GO 异质结 2DEG 浓度可以通过改变 Al 含量或掺杂浓度来实现, 但一方面较高的 Al 含量 (>0.3) 会导致 β -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ 出现相分离^[12], 而高浓度掺杂会带来强烈的杂质散射, 限制电子迁移率. 对 β -AGO/GO 进行调制掺杂是一种能够兼顾电子浓度和迁移率的折中方案, 最近报道的调制掺杂的 β -AGO/GO 异质结, 2DEG 面

* 国家自然科学基金 (批准号: 62104190)、中国博士后科学基金 (批准号: 2019M653881XB) 和陕西省自然科学基金基础研究计划 (批准号: 2019JM-323) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liqun@xaut.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: hexiaomin@xaut.edu.cn

密度通常在 $2.0 \times 10^{12} - 6.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 之间, 电子迁移率在 $140 - 180 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 之间 [9,12-13]. 但相对于传统的 GaN 基异质结, β -AGO/GO 较小的导带阶 (0.4 eV, Al 含量为 0.3) 难以形成 10^{13} cm^{-2} 量级的 2DEG 面密度, 并且调制掺杂也增加了工艺复杂度, 容易在器件中引入寄生沟道 [9].

β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) 晶面与纤锌矿结构 AlN (0002) 晶面具有相似的原子排列, 能够形成 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结, 是 β -Ga₂O₃ HEMT 器件的候选材料. 如图 1 所示, β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) 晶面的 Ga 原子和 O 原子, AlN (0002) 晶面的 Al 原子和 N 原子, 都呈六角形排列, 边长分别为 1.753 Å 和 1.797 Å, β -Ga₂O₃ 在 *b* 轴方向与 AlN (0002) 晶面的晶格失配为 2.4% [14], 二者具有结合为 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结的结构基础. 近两年, 多个研究组都在 β -Ga₂O₃ 的 ($\bar{2}01$) 晶面上生长出了高质量的 AlN/ β -Ga₂O₃ 和 GaN/ β -Ga₂O₃ 异质结, 并利用高分辨透射电子显微镜观察到原子规则排列的界面 [15-16], 外延关系为 β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$)//AlN (0002), β -Ga₂O₃[102]//AlN[-1100] [14]. AlN/ β -Ga₂O₃ HEMT 的仿真研究表明, AlN/ β -Ga₂O₃ 界面处能够形成面密度为 10^{13} cm^{-2} 量级的 2DEG, 并具有优异的功率和频率特性 [17,18]. 相对于 β -AGO/GO 异质结, AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结具有形成更高性能 2DEG 的潜在优势, 包括: 1) AlN 的施主类表面态能够为沟道提供大量电子 [19-20]; 2) AlN 强烈的自发极化、压电极化效应能够诱导电子在 AlN/ β -Ga₂O₃ 界面处聚集 [15,21]; 3) AlN/ β -Ga₂O₃ 界面更大的导带阶 (1.75 eV) 能够产生更强的电子限域性 [14]. 但目前, AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结的发展仍处于初级阶段, 无论从实验上还是理论上, 都需要进一步的研究.

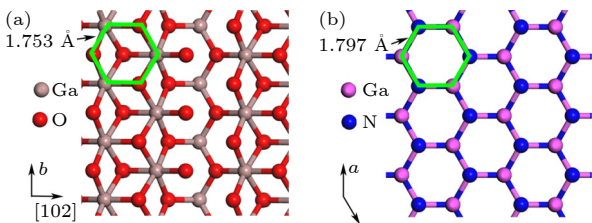


图 1 (a) β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) 晶面和 (b) AlN (0002) 晶面的原子排列

Fig. 1. The atomic arrangement in (a) ($\bar{2}01$) plane of β -Ga₂O₃ and (b) (0002) plane of AlN.

本文基于 AlN、 β -Ga₂O₃ 已知材料特性, 对 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结电学特性进行了理论研究,

预测了 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结的性能潜力. 本文建立了 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结的静电模型, 计算了导带形状和 2DEG 面密度, 分析了 AlN 层的临界厚度, 并利用玻尔兹曼输运理论, 研究了主要散射机制对 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结迁移率的限制作用, 计算了 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结电子迁移率随温度的变化关系. 本文工作能为 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结工艺优化与器件结构设计提供理论参考.

2 理论模型

2.1 静电模型

传统的 III 族氮化物异质结, 如 AlGa_xN/GaN, AlN/GaN, InAlN/GaN, 能够在不进行故意掺杂的情况下形成面密度高达 10^{13} cm^{-2} 的 2DEG, 普遍认为势垒层存在高面密度的施主类表面态, 表面态离化后释放出电子在界面处聚集形成 2DEG, 并在异质结表面留下带正电的离化电荷 [19,22-24]. AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结采用 AlN 为势垒层, 也有可能通过表面态产生高面密度的 2DEG. 因此, 本文建立了如图 2 所示的表面态模型, 认为 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结 2DEG 来源于表面态, 表面态分布于距离表面导带 $E_d = 2.2 \text{ eV}$ 以下的禁带中, 浓度为 $N_{sd} = 5.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}/\text{eV}$. 表面态参数设置参考自 III 族氮化物异质结的报道 [19].

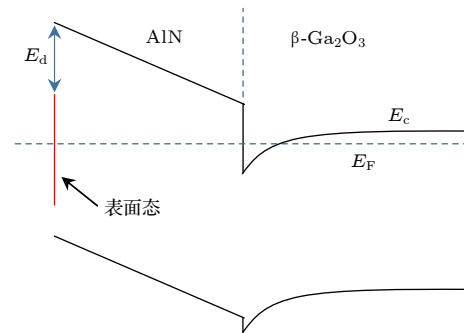


图 2 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结表面态能级分布示意图

Fig. 2. Schematic drawing of energy distribution of surface states in an AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructure.

定义 AlN 的生长方向 ([0001] 晶向) 为 *z* 轴, AlN/ β -Ga₂O₃ 界面位置为坐标原点, AlN 和 β -Ga₂O₃ 层分别位于 $z < 0$ 和 $z > 0$ 区域. 在有效质量近似下, 电子能级 E_i 和波函数 $\xi_i(z)$ 遵循薛定谔方程 [25]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \xi_i(z) + V(z) \xi_i(z) = E_i \xi_i(z), \quad (1)$$

其中, \hbar 为约化普朗克常数, m^* 为电子有效质量, 势能 $V(z)$ 与静电势 $\phi(z)$ 的关系为 $V(z) = -e\phi(z) + \Theta(-z) \cdot \Delta E_c$, e 为电子电荷, $\Theta(z)$ 为阶跃函数, 对 $z \geq 0$, $\Theta(z) = 1$; 对 $z < 0$, $\Theta(z) = 0$, AlN/ β -Ga₂O₃ 界面导带阶 $\Delta E_c = 1.75$ eV^[14]. 静电势 $\phi(z)$ 由异质结中所有电荷成分共同决定, 可以通过泊松方程求得^[25]:

$$\begin{aligned} & -\varepsilon_0 \frac{d}{dz} \left[\varepsilon_s \frac{d}{dz} \phi(z) \right] \\ & = \sigma_{\text{Surf}} \delta(z+d) - \sigma_{\text{Tp}} \delta(z+d) + \sigma_{\text{Ip}} \delta(z) \\ & \quad + n_{d1}(-d < z \leq 0) + n_{d2}(z > 0) - n_e(z), \quad (2) \end{aligned}$$

其中, ε_0 为真空介电常数, ε_s 为相对介电常数, d 为 AlN 层厚度, σ_{Surf} 为离化表面态电荷面密度, σ_{Tp} 和 σ_{Ip} 分别为 AlN 上、下表面的极化电荷面密度, $n_e(z)$ 为电子浓度, n_{d1} 和 n_{d2} 分别为 AlN 和 β -Ga₂O₃ 离化施主电荷浓度. 在这些电荷成分中, σ_{Surf} 和 σ_{Tp} 为 σ_{Ip} 为 z 向的 δ 函数, 其余电荷成分为体函数.

假设在 β -Ga₂O₃ ($\bar{2}01$) 晶面上外延的 AlN 处于完全应变状态, AlN 在 $[0001]$ 方向的自发极化强度 $P_{\text{SP}} = -0.081$ C/m², 压电极化强度为^[26]

$$P_{\text{PE}} = 2 \frac{b_{\text{Ga}_2\text{O}_3} - a_{\text{AlN}}}{a_{\text{AlN}}} \left(e_{31} - e_{33} \frac{c_{13}}{c_{33}} \right), \quad (3)$$

其中 a_{AlN} 为弛豫状态的 AlN 晶格常数, e_{31} , e_{33} 分别为 AlN 压电常数, c_{13} , c_{33} 为 AlN 弹性系数, $b_{\text{Ga}_2\text{O}_3}$ 为 β -Ga₂O₃ 晶格常数. AlN 上、下表面极化电荷面密度分别为

$$\sigma_{\text{Tp}} = P_{\text{SP}} + P_{\text{PE}}, \quad (4a)$$

$$\sigma_{\text{Ip}} = -\sigma_{\text{Tp}}. \quad (4b)$$

值得注意的是, 与 AlN/GaN 异质结不同, AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结中, AlN 为压应变, 压电极化强度指向 $[0001]$ 方向, 与自发极化强度相反, 压电极化强度抵消了部分自发强化强度, 但 AlN 下表面仍带有净剩的正极化电荷.

为了数学上的简化, 近似认为能量大于费米能级 E_F 的表面态全部离化, 则离化的表面态面密度 σ_{Surf} 表示为^[18,27]

$$\sigma_{\text{Surf}} = eN_{\text{sd}} \cdot [V(-d) - E_d - E_F]. \quad (5)$$

电子分布 $n_e(z)$ 表示为^[28]

$$n_e(z) = \sum_i N_{si} \cdot |\xi_i(z)|^2, \quad (6)$$

其中 N_{si} 为子带能级 E_i 上的电子面密度, 取决于 E_F 与 E_i 的相对位置, 将费米-狄拉克公式在整个能量范围内进行统计得到^[29]:

$$N_{si} = \frac{em^*k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right], \quad (7)$$

其中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度. 总的电子面密度 $N_s = \sum_i N_{si}$.

异质结中所有电荷成分应满足电中性条件:

$$\begin{aligned} & \int [\sigma_{\text{Surf}} \delta(z+d) - \sigma_{\text{Tp}} \delta(z+d) + \sigma_{\text{Ip}} \delta(z) \\ & \quad + n_{d1}(-d < z \leq 0) - n_e(z)] dz = 0. \quad (8) \end{aligned}$$

求解 (1)—(8) 式可以分析 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结导带能量和 2DEG 面密度等电学性质.

2.2 迁移率模型

本文考虑声学形变势 (deformation potential, DP) 散射、离化杂质散射 (ionized impurity scattering, IIS)、界面粗糙散射 (interfacial roughness scattering, IRS)、极性光学 (polar optical, PO) 声子散射等散射机制对 2DEG 迁移率的限制作用. DP, IIS, IRS 为弹性散射机制, 可以利用解析表达式来计算能量为 E 的电子动量弛豫时间 $\tau_i(E)$, 其中 $i = \text{DP, IIS, IRS}$, 对动量弛豫时间进行能量平均^[30]:

$$\langle \tau_i(E) \rangle = \frac{\int \tau_i(E) \left[\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right] dE}{\int E \left[\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right] dE}, \quad (9)$$

其中, $f_0(E)$ 为费米-狄拉克分布函数:

$$f_0(E) = \frac{1}{\exp \left(\frac{E - E_F}{k_B T} \right) + 1}. \quad (10)$$

各散射机制限制的迁移率为 $\mu_i = e \langle \tau_i(E) \rangle / m^*$. 使用马西森定则得到总的迁移率^[30]:

$$\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{1}{\mu_i}. \quad (11)$$

2.2.1 声学形变势散射

声学 DP 散射是在中低温区域限制电子迁移率的主要散射机制之一. 2DEG 输运过程中, 费米能级附近的电子是迁移率的决定因素, 而声学声子能量通常远小于费米能级, 因此声学声子散射过程可以近似为弹性碰撞. 声学 DP 散射矩阵元由下式给出^[31]:

$$|M_{k'k}|^2 = \frac{D^2 k_B T}{V \rho u_1}, \quad (12)$$

其中 D 为声学形变势, V 为体积, ρ 为质量密度, u_1 为声速, 动量弛豫时间的倒数为^[31]

$$\frac{1}{\tau_{DP}} = \frac{D^2 k_B T m^*}{2\pi^2 \hbar^3 \rho u_1^2} \int_0^\pi \frac{(1 - \cos \theta)}{\epsilon^2(q)} \left[\int_{-\infty}^\infty |I(q_z)|^2 dq_z \right] d\theta, \quad (13)$$

其中 θ 为散射角, q 和 q_z 分别为平行、垂直于 AlN/ β -Ga₂O₃ 界面方向的声子波矢分量. 本文只考虑第一子带内的电子散射, 散射重叠因子 $I(q_z) = \int \xi_1^2(z) e^{iq_z z} dz$ ^[32]. 采用绝对零度的随机相近似, 屏蔽因子 $\epsilon(q)$ 表示为^[32]

$$\epsilon^2(q) = 1 + \frac{e^2 m^*}{2\pi \hbar^2 \epsilon_0 \epsilon_s q} H(q), \quad (14)$$

其中, 形状因子 $H(q)$ 可写为^[32]

$$H(q) = \int dz \int dz' \xi_1^2(z) \xi_1^2(z') e^{-q|z-z'|}. \quad (15)$$

该屏蔽因子同样应用于其他散射机制.

2.2.2 界面粗糙散射

本文使用高斯形式的相关函数 $C(r) = \Delta^2 \exp(-r^2/\Lambda^2)$ ^[33], 通过平均粗糙高度 Δ 和水平相关长度 Λ 两个参数描述界面粗糙度, 散射矩阵元表述为^[34]:

$$|M_{k'k}|^2 = \frac{e^4 \Delta^2 \Lambda^2}{S_{2D} \epsilon_0^2 \epsilon_s^2} \left(\frac{N_s}{2} \right)^2 \exp\left(-\frac{q^2 \Lambda^2}{4}\right), \quad (16)$$

其中 S_{2D} 为样品面积, 动量弛豫时间的倒数为^[30]:

$$\frac{1}{\tau_{IRS}} = \frac{e^2 \Delta^2 \Lambda^2 N_s^2 m^*}{4\pi \hbar^3 \epsilon_0^2 \epsilon_s^2} \int_0^\pi \exp\left(-\frac{q^2 \Lambda^2}{4}\right) \frac{(1 - \cos \theta)}{\epsilon^2(q)} d\theta. \quad (17)$$

2.2.3 离化杂质散射

AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结中存在故意或非故意掺杂, 杂质会引起晶格畸变, 通过形变势散射电子, 电离杂质还可以通过库仑作用散射电子. 通常来说, 晶格畸变造成的散射远小于库仑散射^[35], 所以本文只考虑电离杂质的库仑散射, 离化杂质的散射矩阵元可以表述为^[36]

$$|M_{IIS}(q)|^2 = \frac{N(z)}{S_{2D}} \left(\frac{e^2 F_c(q, z)}{2\epsilon_0 \epsilon_s q} \right)^2, \quad (18)$$

其中 $N(z)$ 指的是电离杂质浓度, $F_c(q, z)$ 为^[30]

$$F_c(q, z) = \int |\xi_1(z')|^2 e^{-q|z-z'|} dz'. \quad (19)$$

动量弛豫时间的倒数为^[30]

$$\frac{1}{\tau_{IIS}} = \frac{e^4 m^*}{4\pi \hbar^3 \epsilon_0^2 \epsilon_s^2} \int_0^\pi \frac{N(z) |F_c(q, z)|^2 dz}{q^2 \epsilon^2(q)} (1 - \cos \theta) d\theta. \quad (20)$$

本文假设 AlN 和 β -Ga₂O₃ 层各有均匀分布的背景电离杂质, 浓度分别为 $N(z) = n_{d1} = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 和 $N(z) = n_{d2} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

2.2.4 极性光学声子散射

PO 声子的能量与费米能级相当, 对电子产生非弹性散射, 不能准确定义解析形式的动量弛豫时间, 需要直接求解玻尔兹曼输运方程来获得精确的 PO 声子散射率.

PO 声子散射矩阵元为^[37]

$$|M_{k',k}|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_{po}}{2V Q^2 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right), \quad (21)$$

其中, $\hbar \omega_{po}$ 为 PO 声子能量, ϵ_∞ 为高频介电常数, Q 为三维声子波矢. 将玻尔兹曼输运方程应用于极性光学声子散射, 可以得到

$$1 = S_0(E) \Phi(E) - S_a(E) \Phi(E + \hbar \omega_{po}) - S_e(E) \Phi(E - \hbar \omega_{po}), \quad (22)$$

其中, $\Phi(E)$ 是需要确定的微扰项, $S_0(E)$ 表示 k 态电子经 PO 声子散射跃迁到 k' 态的散射率, $S_a(E)$ 和 $S_e(E)$ 分别为 k' 态电子吸收、释放 1 个 PO 声子跃迁到 k 态的散射率, 具体的表达式可以参考 Kawamura 等^[32] 的报道. 本文使用迭代法求解 (22) 式, 将求得的 $\Phi(E)$ 代替 (9) 式中的 $\tau_i(E)$ 可以获得 PO 声子散射的动量弛豫时间 $\langle \tau_{PO}(E) \rangle$. 如果在 (22) 式中使用 $S_0(E) + \frac{1}{\tau_{ELA}}$ 代替 $S_0(E)$, 其中 $\frac{1}{\tau_{ELA}} = \frac{1}{\tau_{DP}} + \frac{1}{\tau_{IIS}} + \frac{1}{\tau_{IRS}}$ 为本文考虑的弹性散射率之和, 则可以得到所有散射机制共同限制的动量弛豫时间 $\langle \tau_{TOT}(E) \rangle$.

3 结果与分析

论文使用 Octave 软件编程, 依次计算了表面态模型和迁移率模型, 材料参数如表 1 所示.

表 1 计算过程中用到的 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结参数 (m_0 为自由电子质量)

 Table 1. Parameters of AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructure employed in calculations (m_0 is the free electron mass).

物理量	符号/单位	参数值
AlN 晶格常数	$a_{\text{AlN}}/\text{\AA}$	3.112 ^[26]
AlN 压电常数	$e_{31}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	-0.60 ^[26]
	$e_{33}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	1.55 ^[26]
AlN 弹性系数	c_{13}/GPa	9.0 ^[26]
	c_{33}/GPa	10.7 ^[26]
β -Ga ₂ O ₃ 晶格常数	$b_{\text{Ga}_2\text{O}_3}/\text{\AA}$	3.037 ^[14]
β -Ga ₂ O ₃ 质量密度	$\rho/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	5.88 ^[38]
β -Ga ₂ O ₃ 声学形变势	D/eV	6.9 ^[39]
β -Ga ₂ O ₃ 纵声学模速度	$u_l/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	6.8×10^3 ^[39]
β -Ga ₂ O ₃ 电子有效质量	m^*	$0.28m_0$ ^[40]
β -Ga ₂ O ₃ 高频介电常数	ε_∞	3.57 ^[41-43]
β -Ga ₂ O ₃ 低频介电常数	ε_s	10.2 ^[41-43]
β -Ga ₂ O ₃ 极性光学声子能量	$\hbar\omega_{\text{PO}}/\text{meV}$	94 ^[44,45]

图 3 为利用均匀分布表面态模型计算得到的 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结导带形状和电子浓度分布, AlN 厚度 $d = 6$ nm. AlN 势垒层位于 $z < 0$ 区域, AlN 自发极化效应与压电极化效应, 在 AlN 层形成垂直于 AlN/ β -Ga₂O₃ 界面的极化场, 导致 AlN 层导带形状近似线性变化. AlN 层极化效应在 AlN/ β -Ga₂O₃ 界面引起面密度为 2×10^{13} cm⁻² 的正极化电荷, 结合 AlN/ β -Ga₂O₃ 界面 1.75 eV 的导带阶, 使得电子密集聚集在界面处 β -Ga₂O₃ 一侧, 形成高浓度 2DEG. β -Ga₂O₃ 深处电场为 0, 导带

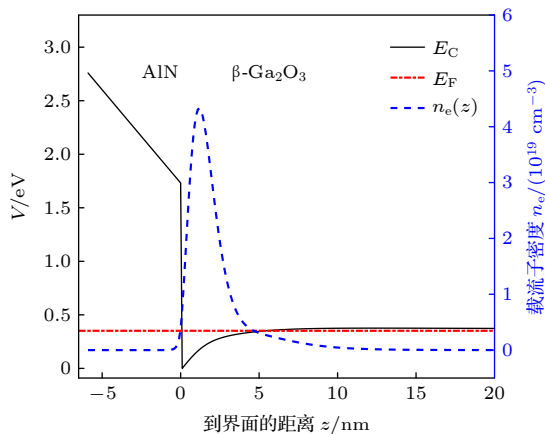

 图 3 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结导带形状和 2DEG 浓度分布, AlN 厚度 $d = 6$ nm

 Fig. 3. The conduction band profile and spatially distributed density of the 2DEG in an AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructure with an AlN thickness of 6 nm.

能量随着远离界面渐变为常数. 2DEG 面密度 $N_s = 1.0 \times 10^{13}$ cm⁻², 最高电子浓度为 4.3×10^{19} cm⁻³. 沟道中 92% 的电子分布在界面附近 5 nm 范围内, 电子到界面的平均距离为 2.2 nm. 由于背景杂质浓度较小, 对导带形状与 2DEG 浓度的影响不大.

图 4 为 AlN/ β -Ga₂O₃ 异质结 2DEG 浓度对 AlN 厚度的依赖关系. 结合图 2 可知, 随着 AlN 层厚度的增大, 越来越多的表面态上升到费米能级以上, 释放出更多电子, 形成了面密度更大的 2DEG. 但随着 AlN 厚度增大, 费米能级随之增大, 导带底到费米能级的能量差即表面势增长速度降低, 导致 2DEG 面密度增长趋势变缓.

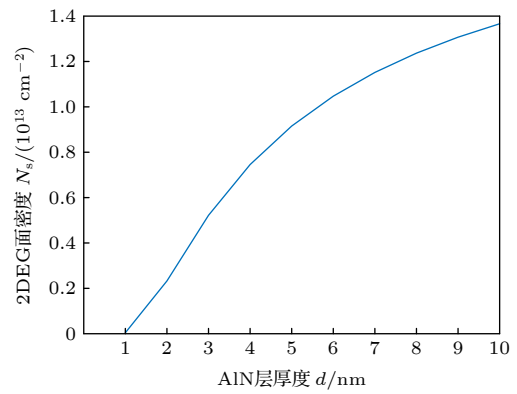


图 4 2DEG 面密度对 AlN 厚度的依赖关系

Fig. 4. Dependence of the 2DEG sheet density on the AlN thickness.

需要注意的是, AlN 和 β -Ga₂O₃ 存在 2.4% 的晶格失配^[14], 随着 AlN 厚度增大到临界厚度以上, AlN 层将因应力过大发生晶面滑移, 产生应力弛豫现象, 影响器件性能和可靠性. 因此, 器件设计应使 AlN 层保持在临界厚度以下. Fischer 等^[46]指出, 异质外延的半导体薄膜, 外延层应变与失配位错满足下面的关系:

$$\begin{aligned} & (a_{\text{AlN}} - b_{\text{Ga}_2\text{O}_3})/a_{\text{AlN}} \\ &= \frac{b \cos \lambda}{2h_c} \left[1 + \left(\frac{1 - v \cos^2 \alpha}{2\pi (1 + v \cos^2 \lambda)} \right) \ln \left(\frac{h_c}{b} \right) \right]. \quad (23) \end{aligned}$$

代入 β -Ga₂O₃ 晶格常数 $b_{\text{Ga}_2\text{O}_3} = 0.3037$ nm^[14], AlN 晶格常数 $a_{\text{AlN}} = 0.3112$ nm, AlN 泊松比 $v = 0.608$ ^[47], 考虑到失配位错更有可能是刃位错, 取位错伯格矢量绝对值 $b = 0.3037$ nm, λ 为位错伯格矢量与界面方向的夹角, α 是伯格矢量与位错线方向的夹角, λ 和 α 分别取 0° 和 90° . 最终计算得到 AlN 层的临界厚度 $h_c = 7.09$ nm. 在后续计算中, 除非特殊说明, 选取 AlN 层厚度为 6 nm.

图 5 为 IRS 限制的迁移率对水平相关长度 Λ 的依赖关系. 界面粗糙限制的迁移率随 Λ 的增大先减小后增大, 呈“V”字形变化. $\Lambda < 1.5$ nm 时, 越小的 Λ 意味着界面高度在沿界面方向的变化越迅速, 固定长度范围内的高度平均值越均匀, 相应的迁移率越大. IRS 限制的迁移率在 $\Lambda = 1.5$ nm 时取得最小值. 当 Λ 进一步增大, 意味着界面高度的变化越来越平缓, IRS 限制迁移率也越来越大. 对于给定的 Λ , IRS 限制的迁移率与平均粗糙高度的平方 Δ^2 呈反比关系.

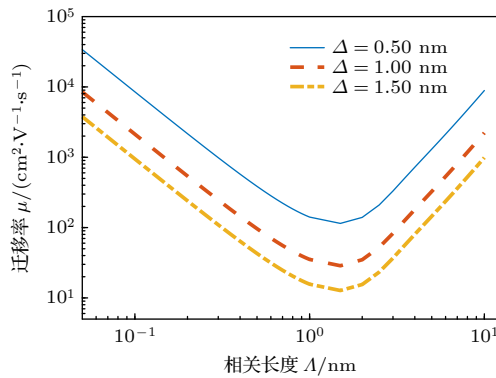


图 5 IRS 限制的迁移率对相关长度 Λ 的依赖关系
Fig. 5. Dependence of the mobility limited by IRS on correlation length Λ for different roughness heights.

图 6 为 300 K 时各弹性散射机制限制的动量弛豫时间对电子能量的依赖关系. 随着能量的增大, τ_{IIS} 与 τ_{IRS} 单调增大, τ_{DP} 单调减小. 在界面粗糙散射和离化杂质散射中, 电子能量越大, 散射角越小, 电子波矢改变量越小, 动量弛豫时间越大. 但声学形变势散射是近程散射机制, 电子能量增大不会显著影响散射角, 且高能电子受到的屏蔽效应更弱, 导致 τ_{DP} 随能量的增大而减小.

图 7 显示了弹性散射限制的动量弛豫时间 τ_{ELA} 及所有散射机制限制的动量弛豫时间 τ_{TOT} 对能量的依赖关系. 随着电子能量的增大, τ_{ELA} 单调增长, 但考虑 PO 声子散射影响的 τ_{TOT} 随着电子能量的增大而间断地发生跃变. 这是因为每当电子能量 ($E_k = E - E_1$, E_1 表示第一子带的能量) 增加 PO 声子能量 $\hbar\omega_{\text{po}}$ 的整数倍时, 电子就会具备发射更多 PO 声子的能力, 因此 τ_{TOT} 突然减小. 在低温区域, PO 声子数目很少, 且低能电子 ($E_k/\hbar\omega_{\text{po}} < 1$) 不满足发射 PO 声子的条件, 所以 PO 散射对低温区域低能电子的影响很小, τ_{TOT} 与 τ_{ELA} 几乎重合.

当电子能量增大到足以发射 PO 声子 ($E_k/\hbar\omega_{\text{po}} > 1$), PO 散射作用不可忽略, 所以 τ_{TOT} 与 τ_{ELA} 存在巨大差异. 在高温区域, PO 声子的数目很多, 低能电子也可以通过吸收 PO 声子而被散射, 因此 τ_{TOT} 在整个能量范围内都小于 τ_{ELA} .

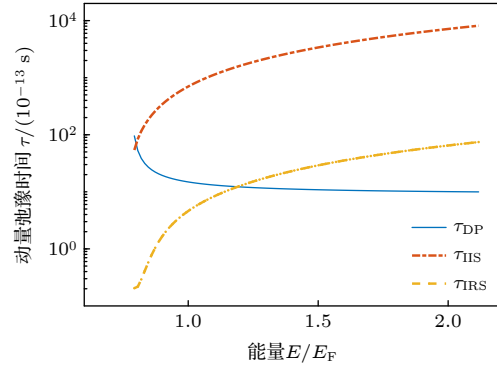


图 6 300 K 时离化杂质散射限制的动量弛豫时间 (τ_{IIS})、界面粗糙散射限制的动量弛豫时间 (τ_{DP})、声学形变势散射限制的动量弛豫时间 (τ_{DP}) 对电子能量的依赖关系
Fig. 6. Dependence of the momentum relaxation time limited by ionized impurity scattering (τ_{IIS}), interface roughness scattering (τ_{RS}) and acoustic DP scattering (τ_{DP}) on the electron energy.

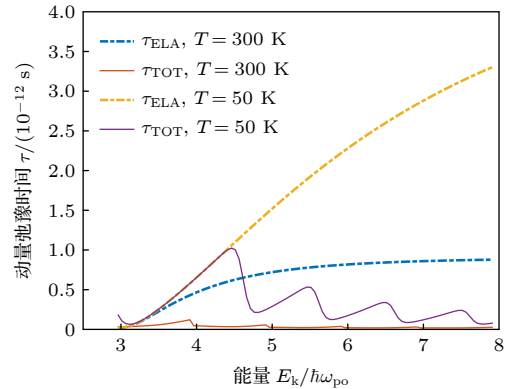


图 7 动量弛豫时间对电子能量的依赖关系
Fig. 7. Dependence of the momentum relaxation time on the electron energy.

图 8 为各散射机制限制的迁移率对 2DEG 面密度的依赖关系. IIS 通过库仑作用散射电子, 随着 2DEG 浓度的增长, 屏蔽作用增强, 所以 IIS 限制的迁移率增加. 高浓度的 2DEG 会产生更强局域场将电子进一步推向界面, 电子受到更强烈的 IRS, 使得 IRS 限制的迁移率单调下降. 2DEG 面密度上升导致费米能级上升, 而费米能级附近的电子是决定迁移率的主要因素, DP 散射和 PO 散射对能量的依赖导致迁移率随 2DEG 面密度增大而减小.

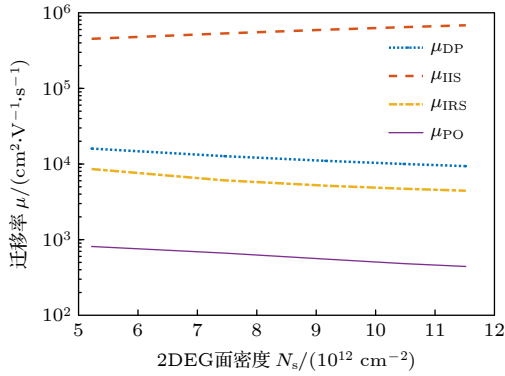


图 8 300 K 时离化杂质散射限制的迁移率 (μ_{IIS})、界面粗糙散射限制的迁移率 (μ_{IRS})、声学形变势散射限制的迁移率 (μ_{DP})、极性光学声子散射限制的迁移率 (μ_{PO}) 对 2DEG 面密度的依赖

Fig. 8. Dependence of the mobility limited by ionized impurity scattering (μ_{IIS}), interface roughness scattering (μ_{IRS}), acoustic DP scattering (μ_{DP}) and PO phonon scattering (μ_{PO}) on the 2DEG sheet density at 300 K.

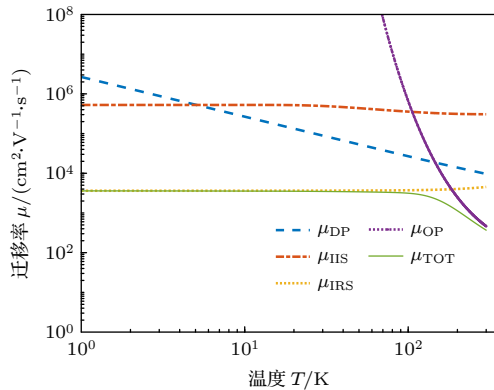


图 9 μ_{DP} , μ_{IIS} , μ_{IRS} , μ_{PO} 以及总的迁移率 (μ_{TOT}) 对温度的依赖关系, 相关长度 $\Lambda = 5$ nm, 粗糙高度 $\Delta = 1$ nm

Fig. 9. Temperature dependence of the μ_{DP} , μ_{IIS} , μ_{IRS} , μ_{PO} , and the total mobility μ_{TOT} , the correlation length $\Lambda = 5$ nm and roughness height $\Delta = 1$ nm.

图 9 为各散射机制分别限制的迁移率以及共同作用下的总迁移率随温度的变化关系. IRS 与 IIS 限制的迁移率对温度的微弱依赖, 来自于温度对屏蔽效应、费米能级等因素的影响. 由于本文只考虑了浓度很小的背景离化杂质, IIS 对迁移率的限制作用远小于 IRS. 温度较低时, 声学声子和极性光学声子数目很少, 对迁移率的影响很小, 因此 $T < 148$ K 的中低温区域, IRS 是限制迁移率的主导机制. 温度升高导致声学声子数目和极性光学声子数目快速增加, 因此声学 DP 和 PO 声子散射限制的迁移率随温度的升高而减小. 且由于极性光学声子能量更大, 对电子的散射造成更大的能量、动

量损失, 因此 PO 声子限制的迁移率下降速度更快. $T > 148$ K 的中高温区域, PO 声子散射是限制迁移率的主导散射机制. 300 K 时, 各种散射机制限制共同作用限制的迁移率为 $368.6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 大于已有报道的 $\beta\text{-AGO}/\text{GaO}$ 异质结电子迁移率 [9,12–13]. 并且, 值得注意的是, 根据各散射机制对 2DEG 面密度依赖关系 (见图 8), 通过减小 AlN 厚度来降低 2DEG 面密度降, 可以进一步使 AlN/ $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 异质结室温迁移率上升到 $500 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 以上.

4 结 论

本文基于表面态模型计算了 AlN/ $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 异质结 2DEG 面密度, 并利用玻尔兹曼输运理论研究了电子输运特性. 结果显示, AlN/ $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 异质结 2DEG 面密度随 AlN 厚度的增大而增大, AlN 厚度为 6 nm 时的 2DEG 面密度为 $1.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. 在非故意掺杂的情况下, 界面粗糙散射是中低温区域限制电子迁移率的主导机制, 极性光学声子散射是高温区域限制迁移率的主导机制, 300 K 时电子迁移率为 $368.6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

参考文献

- [1] Green A J, Speck J, Xing G, et al. 2022 *APL Mater.* **10** 029201
- [2] Ranga P, Bhattacharyya A, Chmielewski A, Roy S, Sun R, Scarpulla M A, Alem N, Krishnamoorthy S 2021 *Appl. Phys. Express* **14** 025501
- [3] Wong M H, Bierwagen O, Kaplar R J, Umezawa H 2021 *J. Mater. Res.* **36** 4601
- [4] Guo D Y, Li P G, Chen Z W, Wu Z P, Tang W H 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 078501 (in Chinese) [郭道友, 李培刚, 陈政委, 吴真平, 唐为华 2019 物理学报 **68** 078501]
- [5] Ponc e S, Giustino F 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033102
- [6] Ghosh K, Singiseti U 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 035702
- [7] Nehate S, Saikumar A K, Sundaram K 2021 *Crit. Rev. Solid State* **47** 538
- [8] Wang D P, Li J N, Jiao A N, Zhang X C, Lu X l, Ma X H, Hao Y 2021 *J. Alloys Compd.* **855** 157296
- [9] Ranga P, Bhattacharyya A, Rishinaramangalam A, Ooi Y K, Scarpulla M A, Feezell D, Krishnamoorthy S 2020 *Appl. Phys. Express* **13** 045501
- [10] Tadjer M J, Sasaki K, Wakimoto D, Anderson T J, Mastro M A, Gallagher J C, Jacobs A G, Mock A L, Koehler A D, Ebrish M, Hobart K D, Kuramata A 2021 *J. Vac. Sci. Technol.* **39** 033402
- [11] Krishnamoorthy S, Xia Z, Joishi C, Zhang Y, McGlone J, Johnson J, Brenner M, Arehart A R, Hwang J, Lodha S, Rajan S 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 023502
- [12] Kalarickal N K, Xia Z B, McGlone J F, Liu Y M, Moore W,

- Arehart A R, Ringel S A, Rajan S 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 215706
- [13] Zhang Y W, Neal A, Xia Z B, Joishi C, Johnson J M, Zheng Y H, Bajaj S, Brenner M, Dorsey D, Chabak K, Jessen G, Hwang J, Mou S, Heremans J P, Rajan S 2018 *Appl. Phys. Lett.* **112** 173502
- [14] Sun H D, Torres Castanedo C G, Liu K K, Li K H, Guo W Z, Lin R H, Liu X W, Li J T, Li X H 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 162105
- [15] Ho S T 2020 *M. S. Dissertation* (New York: Cornell University)
- [16] Yan P R, Zhang Z, Xu Y, Chen H, Chen D Z, Feng Q, Xu S R, Zhang Y C, Zhang J C, Zhang C F, Hao Y 2022 *Vacuum* **204** 111381
- [17] Singh R, Lenka T R, Velpula R T, Jain B, Bui H Q T, Nguyen H P T 2021 *Int. J. Numer. Model. El.* **34** e2794
- [18] Song K, Zhang H C, Fu H Q, Yang C, Singh R, Zhao Y J, Sun H D, Long S B 2020 *J. Phys. D Appl. Phys.* **53** 345107
- [19] Jiao W Y, Kong W, Li J C, Collar K, Kim T H, Losurdo M, Brown A S 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 082103
- [20] Yu C, Debdeep J 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 182112
- [21] Singh R, Lenka T R, Velpula R T, Jain B, Bui H Q T, Nguyen H P T 2020 *J. Semicond.* **41** 102802
- [22] Gordon L, Miao M-S, Chowdhury S, Higashiwaki M, Mishra U K, van de Walle C G 2010 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 505501
- [23] Goyal N, Iniguez B, Fjeldly T A 2013 *AIP Conf. Proc.* **1566** 393
- [24] Goyal N, Fjeldly T A 2016 *IEEE T. Electron Dev.* **63** 881
- [25] Chen Q, Li Q, Yang Y 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 017301 (in Chinese) [陈谦, 李群, 杨莺 2019 物理学报 **68** 017301]
- [26] 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
- [27] Li Q, Chen Q, Chong J 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 027303 (in Chinese) [李群, 陈谦, 种景 2018 物理学报 **67** 027303]
- [28] Zhang Y, Gu S L, Ye J D, Huang S M, Gu R, Chen B, Zhu S M, Zhen 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, 郑有焯 2013 物理学报 **62** 150202]
- [29] Li Q, Zhang J W, Meng L, Hou X 2014 *Phys. Status Solidi B* **251** 755
- [30] Li Q, Zhang J W, Zhang Z Y, Li F N, Hou X 2014 *Semicond. Sci. Technol.* **29** 115001
- [31] Li Q, Zhang J W, Chong J, Hou X 2013 *Appl. Phys. Express* **6** 121102
- [32] Kawamura T, Das Sarma S 1992 *Phys. Rev., B: Condens. Matter.* **45** 3612
- [33] Goodnick S M, Ferry D K, Wilmsen C W 1985 *Phys. Rev. B* **32** 8171
- [34] Gurusinge M N, Davidsson S K, Andersson T G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 45316
- [35] Ishibashi A, Takeishi H, Mannoh M, Yabuuchi Y, Ban Y 1996 *J. Electron. Mater.* **25** 799
- [36] Li J M, Wu J J, Han X X, Lu Y W, Liu X L, Zhu Q S, Wang Z G 2005 *Semicond. Sci. Technol.* **20** 1207
- [37] Anderson D, Zakhleniuk N, Babiker M, Ridley B, Bennett C 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245313
- [38] Parisini, Antonella, Fornari, Roberto 2016 *Semicond. Sci. Technol.* **31** 35023.1
- [39] Zhi G, Verma A, Wu X, Sun F, Hickman A, Masui T, Kuramata A, Higashiwaki M, Jena D, Luo T 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 591
- [40] Varley J B, Weber J R, Janotti A, Van d W, C. G. 2010 *Appl. Phys. Lett.* **108** 142106
- [41] Passlack M, Hunt N, Schubert E F, Zydzik G J, Hong M, Mannaerts J P, Opila R L, Fischer R J 1994 *Appl. Phys. Lett.* **64** 2715
- [42] Passlack M, Hong M, Schubert E F, Kwo J R, Mannaerts J P, Chu S, Moriya N, Thiel F A 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 625
- [43] Rebien M, Henrion W, Hong M, Mannaerts J P, Fleischer M 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 250
- [44] Rode D L 1970 *Phys. Rev. B* **2** 1012
- [45] Liu B, Gu M, Liu X 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 172102
- [46] Fischer A, Kühne H, Richter H 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2712
- [47] Sanchez A M, Pacheco F J, Molina S I, Stemmer J, Aderhold J, Graul J 2001 *J. Electron. Mater.* **30** L17

Electron transport mechanism in AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructures*

Zhou Zhan-Hui Li Qun[†] He Xiao-Min[‡]*(School of Automation and Information Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)*

(Received 29 July 2022; revised manuscript received 28 September 2022)

Abstract

The β -Ga₂O₃ has received much attention in the field of power and radio frequency electronics, due to an ultrawide bandgap energy of ~ 4.9 eV and a high breakdown field strength of ~ 8 MV/cm (Poncé et al. 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033102). The in-plane lattice mismatch of 2.4% between the ($\bar{2}01$) plane of β -Ga₂O₃ and the (0002) plane of wurtzite AlN is beneficial to the formation of an AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructure (Sun et al. 2017 *Appl. Phys. Lett.* **111** 162105), which is a potential candidate for β -Ga₂O₃-based high electron mobility transistors (HEMTs). In this study, the Schrödinger-Poisson equations are solved to calculate the AlN/ β -Ga₂O₃ conduction band profile and the two-dimensional electron gas (2DEG) sheet density, based on the supposition that the 2DEG originates from door-like surface states distributed evenly below the AlN conduction band. The main scattering mechanisms in AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructures, i.e. the ionized impurity scattering, interface roughness scattering, acoustic deformation-potential scattering, and polar optical phonon scattering, are investigated by using the Boltzmann transport theory. Besides, the relative importance of different scattering mechanisms is evaluated. The results show that at room temperature, the 2DEG sheet density increases with the augment of AlN thickness, and reaches 1.0×10^{13} cm⁻² at an AlN thickness of 6 nm. With the increase of the 2DEG sheet density, the ionized impurity scattering limited mobility increases, but other scattering mechanisms limited mobilities decrease. The interface roughness scattering dominates the mobility at low temperature and moderate temperature ($T < 148$ K), and the polar optical phonon scattering dominates the mobility at temperatures above 148 K. The room-temperature mobility is 368.6 cm²/(V·s) for the AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructure with an AlN thickness of 6 nm.

Keywords: AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructures, two-dimensional electron gas, electron transport, mobility**PACS:** 85.30.De, 85.25.-j, 74.78.Fk, 72.10.-d**DOI:** 10.7498/aps.72.20221545

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62104190), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2019M653881XB), and the Natural Science Basic Research Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2019JM-323).

[†] Corresponding author. E-mail: liqun@xaut.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: hexiaomin@xaut.edu.cn

AlN/ β -Ga₂O₃异质结电子输运机制

周展辉 李群 贺小敏

Electron transport mechanism in AlN/ β -Ga₂O₃ heterostructures

Zhou Zhan-Hui Li Qun He Xiao-Min

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 028501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221545

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221545>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

AlGa_N/Ga_N高电子迁移率晶体管中二维电子气的极化光学声子散射

Polar optical phonon scattering of two-dimensional electron gas in AlGa_N/Ga_N high electron mobility transistor

物理学报. 2020, 69(15): 157303 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200250>

IV-VI族化合物半导体异质结二维电子气研究进展

Recent progress on IV-VI compound semiconductor heterojunction two-dimensional electron gas

物理学报. 2019, 68(16): 166801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191074>

InAlN/GaN异质结二维电子气波函数的变分法研究

Variational study of the 2DEG wave function in InAlN/GaN heterostructures

物理学报. 2018, 67(2): 027303 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171827>

Al_xGa_{1-x}N插入层对双沟道*n*-Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN/*i*-Al_xGa_{1-x}N/GaN HEMT器件性能的影响

Effect of inserted Al_xGa_{1-x}N layer on characteristic of double-channel *n*-Al_{0.3}Ga_{0.7}N/GaN/*i*-Al_xGa_{1-x}N/GaN HEMT

物理学报. 2022, 71(16): 167301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220403>

β -Ga₂O₃纳米材料的尺寸调控与光致发光特性

Size Regulation and Photoluminescence Properties of β -Ga₂O₃ Nanomaterials

物理学报. 2020, 69(10): 108102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200158>

磷化铟高电子迁移率晶体管外延结构材料抗电子辐照加固设计

Structure parameters design of InP based high electron mobility transistor epitaxial materials to improve radiation-resistance ability

物理学报. 2022, 71(3): 037202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211265>