

InGaN插入层对AlGaN/GaN界面电子散射的影响

宋莉娜 吕燕伍

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

Song Li-Na Lü Yan-Wu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 177201 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20202223

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202223>

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

AlGaN/GaN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 AlGaN/GaN high electron mobility transistor

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

AlGaN插入层对InAlN/AlGaN/GaN异质结散射机制的影响

Effects of AlGaN interlayer on scattering mechanisms in InAlN/AlGaN/GaN heterostructures

物理学报. 2019, 68(1): 017301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181663>

电子散射和能量分配方式对电子输运系数的影响

Influence of electron scattering and energy partition method on electron transport coefficient

物理学报. 2021, 70(13): 135101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202021>

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>

表面低配位原子对声子的散射机制

Mechanism of phonon scattering by under-coordinated atoms on surface

物理学报. 2019, 68(8): 086501 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190194>

黑磷的多声子共振拉曼散射

Resonant Multi-phonon Raman scattering of black phosphorus

物理学报. 2020, 69(16): 167803 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200696>

InGaN 插入层对 AlGaIn/GaN 界面 电子散射的影响*

宋莉娜 吕燕伍†

(北京交通大学理学院, 北京 100044)

(2020 年 12 月 29 日收到; 2021 年 4 月 17 日收到修改稿)

本文研究 InGaIn 作为 AlGaIn/GaN 插入层引起的电子输运性质的变化, 考虑了 AlGaIn 和 InGaIn 势垒层的自发极化与压电极化对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 双异质结高电子迁移率晶体管中极化电荷面密度、二维电子气 (2DEG) 浓度的影响, 理论分析了不同 In 摩尔组分下, InGaIn 厚度与界面粗糙度散射、随机偶极散射和极性光学声子散射之间的关系. 计算结果表明: 界面粗糙度散射和随机偶极散射对双异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 的电子输运性质有重要影响, 极性光学声子散射对其影响最弱; 2DEG 浓度、界面粗糙度散射、随机偶极散射和极性光学声子散射的强弱由 InGaIn 势垒层厚度和 In 摩尔组分共同决定.

关键词: 二维电子气浓度, 界面粗糙度散射, 随机偶极散射, 极性光学声子散射

PACS: 72.10.-d, 72.20.Dp, 73.61.Ey

DOI: 10.7498/aps.70.20202223

1 引言

与其他非 GaN 基单异质结相比, 传统的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结材料具有相对较强的压电极化与自发极化效应, 使得其异质界面存在高密度和高迁移率的二维电子气 (2DEG), 在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 界面实现的 2DEG 浓度高达 10^{13} cm^{-2} , 远超 AlGaAs/GaAs 系统中可实现的浓度, 该特性使得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 单异质结材料广泛用于高频、大功率器件领域^[1-3]. 2DEG 的形成是高自发极化和压电极化, 以及在势垒顶部分布表面施主态所致, 并且 2DEG 的浓度和它的迁移率是氮化镓异质结器件的主要参数, 决定与其相关的高电子迁移率晶体管的频率与功率特性^[4]. 科研工作者针对单异质结材料 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 的载流子限制、2DEG 浓度的调控和载流子迁移率, 以及器件性能的改善做

了大量的研究工作^[5-9], 促进了这类单异质结构器件的应用.

实验研究表明, 在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 单异质结中间生长一层 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 作为沟道层, 使原先的单异质结转变为双异质结. 与原先的单异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 相比, 双异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 具有更强的载流子限制, 更高的迁移率和 2DEG 浓度, 同时可以显著改善器件性能^[10]. 这些优良特征促使实验研究工作者开展这方面的研究, Chakraborty 等^[11] 用分子束外延法在 GaN/Si(111) 上生长 AlGaIn/InGaIn 异质结构, 同时研究 AlGaIn/InGaIn/GaN 异质结的反向偏置漏电流机制; Bag 等^[12] 通过实验结果推测 InGaIn 的不溶性阻碍了高质量 AlGaIn/InGaIn 异质结的外延生长, 针对高速器件, AlGaIn/InGaIn/GaN 的性能可能优于 AlGaIn/GaN 的性能; Simin 等^[13] 的仿真结果表明, 双异质结构 AlGaIn/InGaIn/GaN 场效应晶体管在带阶和极化电荷的双重作用下, 实现对二维载

* 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

波的限制, 提高了其输出功率, 降低其增益压缩. 然而, 针对插入 InGaN 层增加 2DEG 浓度的机制, 没有进行过系统的理论计算. InGaN 插入层相对于 AlGaN 和 GaN 面都存在晶格应变, 在 Al 摩尔组分相同的条件下, AlGaN/InGaN 异质界面处的极化感应电荷要高 1 个数量级, 这些都会导致面载流子和迁移率的增加. 早期研究工作主要针对插入 InGaN 层厚度对 2DEG 浓度的影响, 并未考虑实际情况下 In 摩尔组分和 InGaN 势垒层厚度对 2DEG 浓度的共同影响, 而 2DEG 浓度对界面粗糙度散射、随机偶极散射、极性光学声子散射皆有影响. 本文以 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 双异质结中 2DEG 为研究对象, 考虑有限厚度的势垒层, 计入各层的自发极化和压电极化效应, 给出 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 双异质结构中的 2DEG 特性, 讨论在相同 Al 摩尔组分和 AlGaN 势垒层厚度的情况下, 改变 In 摩尔组分和 InGaN 势垒层厚度对 2DEG 浓度、界面粗糙度散射、随机偶极散射和极性光学声子散射的影响, 研究结果对控制 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 双异质结结构中的 2DEG 浓度和提高电子迁移率有重要意义.

2 理论模型和计算方法

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

使用分子束外延法生长制备双异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 的每层势垒都有其特定的结构特征^[14]. 衬底 GaN 层厚度通常在几百到一千纳米不等, 而 AlGaN 和 InGaN 层的厚度通常为十几至几十纳米, 与 GaN 层相比, AlGaN 和 InGaN 层的厚度很薄, 故可以认为 GaN 层处于松弛状态, 而 AlGaN 和 InGaN 层则处于拉伸状态, 自发极化和压电极化的感应电荷将同时存在于沟道层 InGaN 和 AlGaN 势垒层中, 而 GaN 层中只有自发极化电荷. 相比于 InGaN 层的 2DEG 浓度, GaN 层感应出的载流子浓度很小可忽略不计. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT 结构的简化示意图如图 1 所示. 界面 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 中, 极化电荷面密度用 σ_1 表示; 在界面 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 中, 极化电荷面密度用 σ_2 表示, 两界面极化电荷面密度表达式为^[15]:

$$|\sigma_1| = |P_{\text{SP}}(\text{AlGaN}) + P_{\text{PE}}(\text{AlGaN}) - P_{\text{SP}}(\text{InGaN}) - P_{\text{PE}}(\text{InGaN})|, \quad (1)$$

$$|\sigma_2| = |P_{\text{SP}}(\text{InGaN}) + P_{\text{PE}}(\text{InGaN}) - P_{\text{SP}}(\text{GaN})|, \quad (2)$$

其中, P_{SP} 为自发极化, P_{PE} 为压电极化.

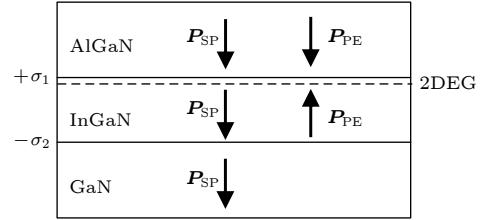


图 1 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结结构图

Fig. 1. The structure of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ heterojunction.

(1) 式和 (2) 式常规的计算方法是: 分别计算 AlGaN 势垒层和 InGaN 势垒层的自发极化 P_{SP} 和压电极化 P_{PE} , 以及 GaN 的自发极化值, 然后分别代入两个表达式中进行计算.

对于 AlGaN 层, 通过在 GaN 和 AlN 的物理量之间的线性插值计算 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的相关参数, InGaN 层同理, 其中 x 表示 Al 的摩尔组分, y 表示 In 的摩尔组分. 但是, 简单的晶格常数线性插值并不适用于计算 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 的带隙, 带隙的计算会涉及到它的弯曲参数^[16]. 表 1 列出计算中所用参数. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 层的压电极化强度 $P_{\text{PE}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})$ 和 $P_{\text{PE}}(\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N})$ 的表达式为:

$$P_{\text{PE}}(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = P_{\text{PE}}(x) = 2 \frac{a_{\text{GaN}} - a(x)}{a(x)} \left[e_{31}(x) - e_{33}(x) \frac{C_{13}(x)}{C_{33}(x)} \right], \quad (3)$$

$$P_{\text{PE}}(\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}) = P_{\text{PE}}(y) = 2 \frac{a_{\text{GaN}} - a(y)}{a(y)} \left[e_{31}(y) - e_{33}(y) \frac{C_{13}(y)}{C_{33}(y)} \right]. \quad (4)$$

在 (3) 式和 (4) 式中, 考虑到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 层的厚度远小于 GaN 层的厚度, 为满足与 GaN 的晶格匹配条件, 可以认为 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 的晶格处于被拉伸状态.

对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结器件或者其他氮化镓基的高频、大功率器件, 有效肖特基势垒高度的大小会影响器件的性能^[18]. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 结构的费米能级取决于肖特基势

表 1 AlN, InN, GaN, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 的各项物理参数 (300 K)^[17]
 Table 1. Physical parameters of AlN, InN, GaN, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ ^[17].

参数	AlN	InN	GaN	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	$\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$
$a/(10^{-10} \text{ m})$	3.112	3.545	3.189		
$c/(10^{-10} \text{ m})$	4.982	5.703	5.186		
$\varepsilon/(10^{-11} \text{ F}\cdot\text{m}^{-1})$	7.53	13.50	7.88		
C_{13}/GPa	108	92	103	$xP_{\text{AlN}} + (1-x)P_{\text{GaN}}$	$yP_{\text{InN}} + (1-y)P_{\text{GaN}}$
C_{33}/GPa	373	224	405		
$e_{31}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	-0.6	-0.57	-0.49		
$e_{33}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	1.46	0.97	0.73		
$P_{\text{SP}}/(\text{C}\cdot\text{m}^{-2})$	-0.081	-0.032	-0.029		

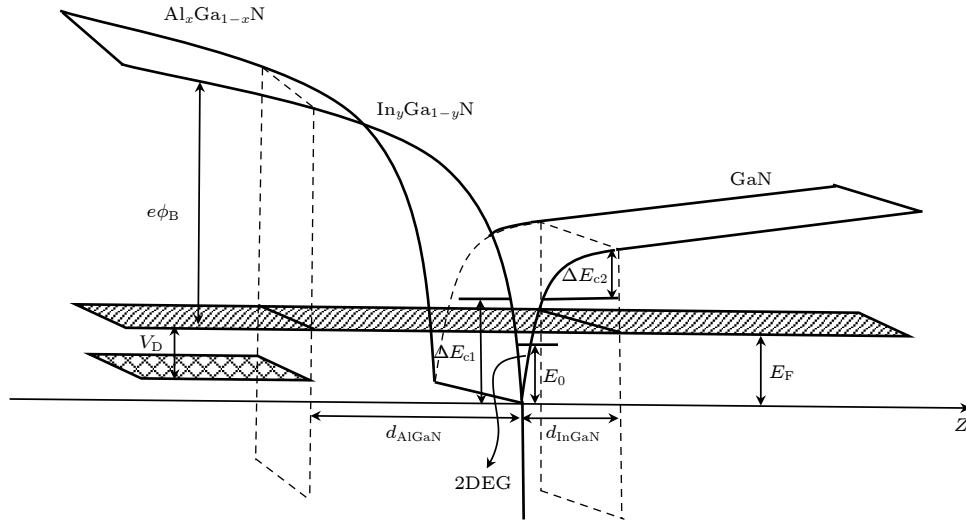


图 2 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结导带剖面示意图

Fig. 2. Schematic diagram of conduction band profile of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ structure.

垒高度, 而肖特基势垒高度由 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒的 Al 摩尔组分和 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 势垒的 In 摩尔组分共同决定. 同时, 肖特基势垒高度的变化会导致 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 势垒层中的 2DEG 浓度和能级的变化. 图 2 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 结构的导带示意图, 整个异质结在电子输运过程中始终满足电中性条件. σ_1 和 σ_2 代表异质界面 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 和 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 上极化电荷面密度; ε_1 , ε_2 和 ε_3 分别代表 AlGaIn, InGaIn, GaN 的相对介电常数; E_F 代表费米能级; ΔE_{c1} 代表 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 异质界面的导带带阶; ΔE_{c2} 代表 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 异质界面的导带带阶; d_{AlGaIn} 和 d_{InGaIn} 分别代表 AlGaIn 和 InGaIn 势垒层厚度; $e\phi_B$ 代表 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 界面的肖特基势垒高度; V_D 代表外加偏压.

参考研究异质结 AlGaAs/GaAs 界面 2DEG 面密度 n_s 的近似方法, 可得异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/$

$\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 中 2DEG 面密度 n_s 与费米能级 E_F 之间的关系为: $E_F = E_0 + n_s/D$, 其中, E_0 为基态能级的大小, $E_0 = \left[\frac{9\pi\hbar n_s e^2}{8\varepsilon_2 \sqrt{8m^*}} \right]^{2/3}$, D 表示电子态有效密度^[19,20], $D = m^*/(\pi\hbar^2)$. 静电平衡分析得: $e\phi_B - eF_1 d_{\text{AlGaIn}} - eF_2 d_{\text{InGaIn}} - \Delta E_{c1} - \Delta E_{c2} + E_F = 0$, 其中 F_1 表示外加偏压 V_D 在 AlGaIn 势垒层产生的电场强度. 本文采用的模型中, F_1 可表示为 $F_1 = (\sigma_1 - en_s)/\varepsilon_1$; F_2 表示外加偏压 V_D 在 InGaIn 势垒层产生的电场强度, 且 $F_2 = (\sigma_2 - en_s)/\varepsilon_2$. 经过化简可得出 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结中 2DEG 面密度 n_s 的表达式为

$$n_s = \frac{\frac{e\sigma_1 d_{\text{AlGaIn}}}{\varepsilon_1} - e\phi_B + \frac{e\sigma_2 d_{\text{InGaIn}}}{\varepsilon_2} + \Delta E_{c1} + \Delta E_{c2} - E_F}{\frac{e^2 d_{\text{AlGaIn}}}{\varepsilon_1} + \frac{e^2 d_{\text{InGaIn}}}{\varepsilon_2}}. \quad (5)$$

肖特基势垒高度是金属功函数与半导体电子亲和能的差, 利用线性插值法可得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 界面的肖特基势垒高度 $e\phi_B$ 的表达式为^[21–23]

$$e\phi_B = 1.3x + 3.27y + 0.84. \quad (6)$$

本文假设 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 和 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 界面均为理想界面, 利用线性插值法可以得出界面的导带带阶公式表达式为

$$\Delta E_c = 0.75 (E_{g1} - E_{g2}), \quad (7)$$

其中, E_{g1} , E_{g2} 分别是界面两侧材料带隙. 已知 AlN , InN , GaN 的带隙分别为 6.2, 1.95, 3.4 eV, 且 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 带隙弯曲参数为 1.0 eV, $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 带隙弯曲参数为 1.4 eV, 利用线性插值法可得它们的带隙表达式分别为:

$$E_g^{\text{AlGa}}(x) = 3.8x - x^2 + 3.4, \quad (8)$$

$$E_g^{\text{InGa}}(y) = -0.05y - 1.4y^2 + 3.4. \quad (9)$$

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

在实际的材料生长过程中, 无论使用何种工艺, 材料界面处存在粗糙是不可避免的, 具体表现为生长平面 (x - y 平面) 内原子层的厚度不均匀, 粗糙度表征了这种厚度的不均匀性. Gökden 等^[24] 曾通过实验研究了 InGaN 沟道层器件界面粗糙度散射载流子的迁移率. 根据散射理论, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 界面粗糙度散射速率 τ_{Rough} 可由 (10) 式给出:

$$\frac{1}{\tau_{\text{Rough}}} = \frac{(\Delta n_s)^2 e^4 m^*}{\varepsilon_2^2 (2\hbar)^3} \int_0^1 \frac{u^4 \exp(-k_F^2 \Lambda^2 u^2)}{\left[u + G(q) \frac{q_{\text{TF}}}{2k_F} \right]^2 \sqrt{1-u^2}} du, \quad (10)$$

其中 Δ 表示粗糙度振幅; Λ 表示相关长度; n_s 表示 2DEG 面密度; e 表示单位电荷量; m^* 表示电子的有效质量; ε_2 表示 InGaN 的介电常数; $u = q/2k_F$, $q = 2k_F \sin(\theta/2)$, $\theta \in (0, \pi)$; θ 是散射前后电子波矢量的夹角; k_F 表示费米波矢量, $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$; $G(q) \approx 1/(1 + bq)$, $b = 1/\int \varphi(z)^4 dz$; q_{TF} 表示 Thomas-Fermi 波矢量, $q_{\text{TF}} = \frac{m^* e^2}{2\pi \varepsilon_2 \hbar^2}$. 异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 的界面粗糙度散射迁移率为

$$\mu_{\text{Rough}} = \frac{e}{m^*} \langle \tau_{\text{Rough}} \rangle. \quad (11)$$

2.3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT 结构中的随机偶极散射

界面上偶极子分布对 2DEG 迁移率的影响远小于其对偶极子在势垒中密度分布的影响. 势垒中因偶极子的分布而产生的屏蔽电势由所有偶极子的傅里叶分量加权求和给出, 对 $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 势垒, 屏蔽电位的表达式可写为^[25]

$$V_{\text{scr}}^{\text{tot}}(q) = \frac{e^{2-q(z_0+c)} \sinh\left(\frac{qd_0}{2}\right)}{\varepsilon_2 (1 - e^{-qc})} \frac{1}{q + q_{\text{TF}}}, \quad (12)$$

其中: z_0 表示 2DEG 的质心距离界面 AlGaIn 的尺度, 本文取 4.2×10^{-10} m; d_0 表示单个偶极子中正负电荷中心间的距离, 本文取 1.5×10^{-10} m; c 为晶格常数. 由此可得简化后随机偶极散射速率 τ_{Dipole} 的表达式为

$$\frac{1}{\tau_{\text{Dipole}}} = \frac{n_D m^*}{2\pi (\hbar k_F)^3} \int_0^{2k_F} |V_{\text{scr}}^{\text{tot}}(q)|^2 \frac{q^2 dq}{\sqrt{1 - \left(\frac{q}{2k_F}\right)^2}}, \quad (13)$$

其中, n_D 表示 2DEG 附近偶极子的面密度, $\frac{1}{n_D} = \frac{\sqrt{3}}{4} a^2$.

异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 的随机偶极散射迁移率由 (14) 式表述:

$$\mu_{\text{Dipole}} = \frac{e}{m^*} \langle \tau_{\text{Dipole}} \rangle. \quad (14)$$

2.4 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT 结构中的极性光学声子散射

极性光学声子散射是限制相对高温下迁移率的主要散射机制, Leburton 曾对极性光学声子散射速率做了精确的计算. 通过结合散射和散射项的 Boltzmann 方程的数值迭代解得到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}$ 的极性光学声子散射速率 τ_{op} 的表达式可以写为

$$\frac{1}{\tau_{\text{op}}} = \frac{2\pi e^2 \omega_0 N(T) G(k_0)}{\varepsilon^* k_0 \hbar^2 \left(1 + \frac{1 - \exp(-M)}{M} \right)}, \quad (15)$$

其中, $\omega_0 = 91.2 \text{ meV}/\hbar$ 表示极性光学声子的角频率; $N(T) = 1/\exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right) - 1$ 表示由 Bose-Einstein

统计得到的声子数; $k_0 = (2m^*\omega_0/\hbar)^{1/2}$ 表示极性光学声子的波矢; $G(k_0) = b(8b^2 + 9k_0b + 3k_0^2)/8(k_0 + b)^3$, 其中 b 是由能量最小化决定的变分参数; $\frac{1}{\varepsilon^*} = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}$, 其中 ε_0 和 ε_∞ 是 InGa_{1-x}N 沟道层的低频和高频介电常数; $M = \frac{\pi\hbar^2 n_s}{m^* k_B T}$ 是与 2DEG 浓度和温度 T 有关的常数.

异质结 Al_xGa_{1-x}N/In_yGa_{1-y}N/GaN 的极性光学声子散射迁移率为

$$\mu_{\text{op}} = \frac{e}{m^*} \langle \tau_{\text{op}} \rangle. \quad (16)$$

3 计算结果与分析

对于半导体异质结 Al_xGa_{1-x}N/In_yGa_{1-y}N/GaN 的输运性质的研究, 本文从下面几个方面进行讨论: In_yGa_{1-y}N 势垒层的厚度和 2DEG 浓度的关系曲线如图 3 所示. 图中的实验数据点是 In 摩尔组分含量为 0.1 时得到的实验数据, 由此可知, 理论计算结果与实验数据基本一致 [26–28]. 插入 In_yGa_{1-y}N 层会使沟道层中 2DEG 浓度升高, 但 In 摩尔组分的增加会在一定程度上提高 2DEG 的浓度: In 摩尔组分含量越高, 2DEG 浓度随 InGa_{1-x}N 势垒层厚度的升高越快, 且当 InGa_{1-x}N 势垒层的厚度处于区间 0–5 nm 时, 2DEG 浓度保持在相对较高的水平.

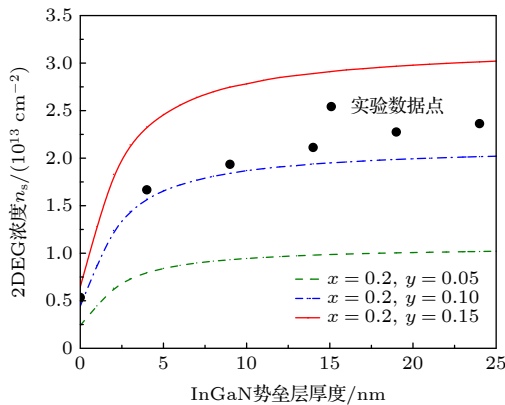


图 3 在不同 In 摩尔组分下, InGa_{1-x}N 势垒层厚度和二维电子气浓度的关系

Fig. 3. The relationship between the thickness of InGa_{1-x}N and 2DEG sheet density under different In mole fraction.

InGa_{1-x}N 势垒层厚度和粗糙度散射迁移率之间的关系如图 4 所示. 界面粗糙度散射限制的迁移率与 2DEG 浓度的值成反比. 图中实验数据点是 In 摩尔组分含量为 0.15 时的实验数据 [29,30], 可以

看出与理论计算得出的结果相对更为接近, 因此本文中采用理论计算的方法是可行的.

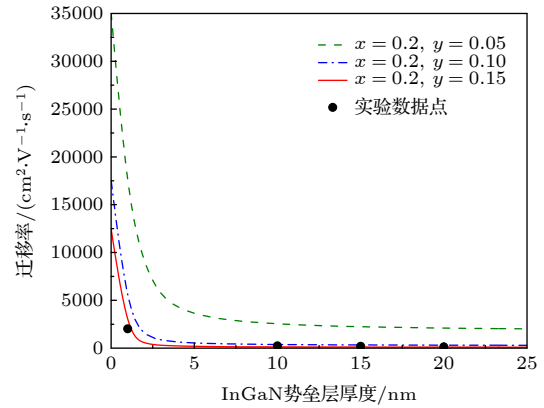


图 4 在不同 In 摩尔组分下, InGa_{1-x}N 势垒层厚度与界面粗糙度散射迁移率之间的关系

Fig. 4. The relationship between the thickness of InGa_{1-x}N and mobility limited by interface roughness scattering under different In mole fraction.

InGa_{1-x}N 势垒层厚度和偶极子散射迁移率之间的关系如图 5 所示, 图中的实验数据点代表的是 In 摩尔组分含量为 0.15 的实验数据 [31], 本文计算结果与现存的实验数据存在一定误差, 理论模型需要进行进一步细化, 减小误差. 误差可能来自计算屏蔽电位的过程中质心距离和正负电荷中心距离的取值. InGa_{1-x}N 势垒层厚度的增加会提升随机偶极散射对载流子迁移率的影响, 且 In 摩尔组分越大, 随机偶极散射限制的迁移率升高越快, 证明 In 摩尔组分含量降低会大大降低随机偶极散射对载流子迁移率的影响.

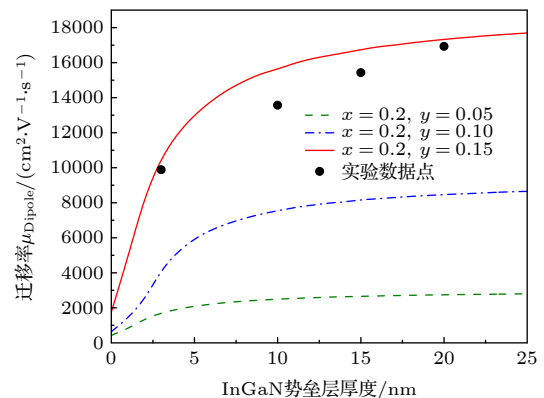


图 5 在不同 In 摩尔组分下, InGa_{1-x}N 势垒层厚度与随机偶极散射的迁移率之间的关系

Fig. 5. The relationship between the thickness of InGa_{1-x}N and mobility limited by random dipole scattering under different In mole fraction.

极性光学声子散射迁移率和 InGaN 势垒层厚度的关系如图 6 所示, 图中实验数据点 [31] 是 In 摩尔组分含量为 0.05 时的实验数据, 与理论计算结果较为接近, 误差在允许范围内. 对于 InGaN 沟道层而言, 随着 InGaN 势垒层厚度的增加, In 组分含量越低迁移率下降越慢.

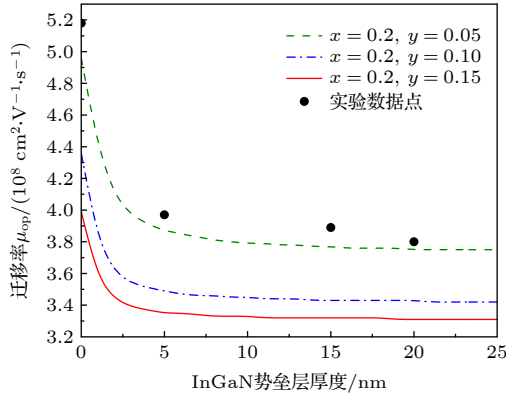


图 6 极性光学声子散射迁移率和 InGaN 势垒层厚度的关系

Fig. 6. The relationship between the thickness of InGaN and polar optical phonon scattering.

综上所述, 在完成不同散射种类影响下迁移率的研究的同时, 我们需要考虑总迁移率与 InGaN 插入层厚度的关系曲线. 以 Al 摩尔组分为 0.2, In 摩尔组分为 0.05 为例, 无 InGaN 插入层时总迁移率只有 $7395.748 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, 此时限制迁移率的主要散射机制是界面粗糙度散射, 随着 InGaN 势垒层厚度增加, 限制迁移率的主要散射机制已经由界面粗糙度散射转变为随机偶极散射. 倘若继续增加 InGaN 势垒层的厚度至 InGaN 势垒层厚度大

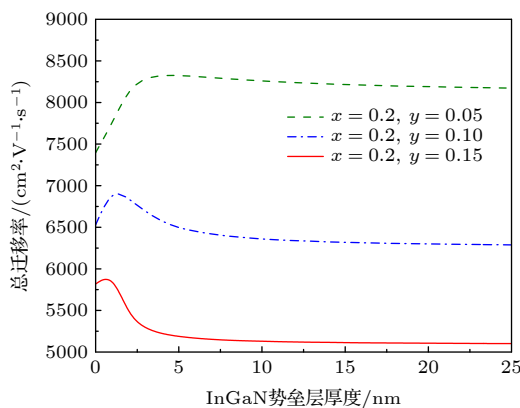


图 7 在不同 In 摩尔组分下, 总迁移率和 InGaN 势垒层厚度的关系

Fig. 7. The relationship between the thickness of InGaN and total mobility under different In mole fraction.

于 5 nm 之后, 2DEG 浓度会保持在某一取值范围稳定不变. 图 7 给出了在不同 In 摩尔组分下, 总迁移率和 InGaN 势垒层厚度的关系. 当 In 摩尔组分为 0.05, 0.10 和 0.15 时, 起初总迁移率也会由于界面粗糙度散射迁移率的降低而明显增大, 但达到极值之后, 随着 InGaN 势垒层厚度的增加, 迁移率降低并没有 In 摩尔组分为 0.15 时明显.

4 结 论

本文给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 双异质结构中 2DEG 浓度 n_s 的解析表达式. 研究了其他条件始终保持固定值不变, InGaN 插入层厚度和 In 摩尔组分对 2DEG 浓度、界面粗糙度散射、随机偶极散射及总迁移率的影响. 计算结果表明: 1) InGaN 插入层厚度增加, 2DEG 浓度先升高然后保持稳定; 2) InGaN 势垒层厚度保持不变时, 偶极散射的迁移率则是与 In 摩尔组分含量成正比; 3) 2DEG 浓度越高, 界面粗糙度散射的迁移率越低, 随机偶极散射的迁移率越高; 4) 极性光学声子散射的迁移率与 InGaN 势垒层厚度和 In 摩尔组分含量成反比. 根据理论计算结果, 在 AlGaIn 势垒层的物理性质保持不变的情况下, 选择合适的 InGaN 势垒层厚度和 In 摩尔组分浓度可以更好地控制 2DEG 浓度与载流子的迁移率, 更有利于将双异质结 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ 广泛应用于实际工业生产中.

参考文献

- [1] Chu R M, Zhou Y G, Zheng Y D, Gu S L, Shen B, Zhang R, Jiang R L, Han P, Shi Y 2003 *Appl. Phys. A* **77** 669
- [2] Chu R M, Zhou Y G, Zheng Y D, Han P, Shen B, Gu S L 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2270
- [3] Arulkumaran S, Ng G I, Ranjan K, Kumar C M M, Foo S C, Ang K S, Vicknesh S, Dolmanan S B, Bhat T, Tripathy S 2015 *Jpn. J. Appl. Phys.* **54** 04DF12
- [4] Ambacher O, Smart G, Shealy J R, Weimann N G, Chu K, Murphy M, Schaff W J, Eastman L F 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 3222
- [5] 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** 195
- [6] Li H, Liu G, Wei H, Jiao C 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 232109
- [7] Iucolano F, Roccaforte F, Giannazzo F, Raineri V 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 113701
- [8] Peng J, Liu X, Ji D, Lu Y 2017 *Thin Solid Films* **623** 98
- [9] Wang C X, Tsubaki K, Kobayashi N, Makimoto T 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 2313
- [10] Ghosh J, Ganguly S 2018 *Jpn. J. Appl. Phys.* **57** 080305

- [11] Chakraborty A, Ghosh S, Mukhopadhyay P, Jana S K, Dinara S M, Bag A, Mahata M K, Kumar R, Das S, Das P 2016 *Electron. Mater. Lett.* **12** 232
- [12] Bag A, Majumdar S, Das S, Biswas D 2017 *Mater. Design.* **133** 176
- [13] Simin G, Hu X, Tarakji A, Zhang J, Koudymov A, Saygi S, Yang J, Khan A, Shur M, Gaska R 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** L1142
- [14] Maeda N, Saitoh T, Tsubaki K, Nishida T, Kobayashi N 1999 *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** L799
- [15] 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
- [16] Liou B T, Lin C Y, Yen S H, Kuo Y K 2005 *Opt. Commun.* **249** 217
- [17] NSMarchive. <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond>. [2021-04-25]
- [18] Tung R T 1991 *Appl. Phys. Lett.* **58** 2821
- [19] Goyal N, Fjeldly T 2016 *IEEE T. Electron. Dev.* **63** 881
- [20] Shur M 1987 *GaAs Devices and Circuits* (New York: Plenum) pp520-535.
- [21] Liu W F, Luo Y L, Sang Y C, Bian J M, Zhao Y, Liu Y H, Qin F W 2013 *Mater. Lett.* **95** 135
- [22] Chen N C, Chang P H, Wang Y N, Peng H C, Lien W C, Shih C F, Chang C A, Wu G M 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 212111
- [23] Zhong H, Liu Z, Lin S, Xu G, Fan Y, Huang Z, Wang J, Ren G, Ke X 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 202101
- [24] Gökden S, Tülek R, Teke A, Leach J H, Fan Q, Xie J, Özgür Ü, Morkoc H, Lisesivdin S B, Özbay E 2010 *Semicond. Sci. Tech.* **25** 045024
- [25] Jena D, Gossard A C, Mishra U K 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 4734
- [26] Pala N, Rumyantsev S, Shur M, Gaska R, Hu X, Yang J, Simin G, Khan M A 2003 *Solid. State. Phys.* **47** 1099
- [27] Gaska R, Yang J W, Osinsky A, Chen Q, Han K, Asif M 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 707
- [28] Lanford W, Kumar V, Schwindt R, Kuliev A, Adesida I, Dabiran A M, Wowchak A M, Chow P P, Lee J W 2004 *Electron. Lett.* **40** 771
- [29] Liu J, Zhou Y, Zhu J, Lau K M, Chen K J 2006 *IEEE Electr. Device. L.* **35** 671
- [30] Khan M, Alim M A, C Gaquière 2021 *Microelectron. Eng.* **238** 111508
- [31] Miah M I, Gray E M 2012 *J. Phys. Chem. Solids.* **73** 444

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

Song Li-Na Lü Yan-Wu[†]

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

(Received 29 December 2020; revised manuscript received 17 April 2021)

Abstract

This paper studies the changes in electronic transport properties caused by InGaN as an AlGa_N/Ga_N insertion layer, and considers the effects of the spontaneous polarization and piezoelectric polarization of AlGa_N and InGa_N barrier layers on the surface density of polarized charge, and the concentration of two-dimensional electron gas (2DEG) in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ double heterojunction high-electron-mobility transistor. The InGa_N thickness and interface roughness scattering, random dipole scattering and polar optical phonons under different In molar compositions are analyzed. The calculation results show that the interface roughness scattering and random dipole scattering have an important influence on the electron transport properties of the double heterojunction $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$, and the polar optical phonon scattering has the weakest influence; 2DEG concentration, the strength of interface roughness scattering, random dipole scattering and polar optical phonon scattering are determined by the thickness of the InGa_N barrier layer and the molar composition of In. This paper takes 2DEG in the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ double heterojunction as the research object, considering the barrier layer of finite thickness, taking into account the spontaneous polarization effect and piezoelectric polarization effect of each layer, and giving $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 2DEG characteristics in the $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ double heterostructure, discussing the scattering of 2DEG concentration and interface roughness by changing the In molar composition and the thickness of the InGa_N barrier layer under the same Al molar composition and the thickness of the AlGa_N barrier layer, Random dipole scattering and polar optical phonon scattering. The results of the present study are of great significance in controlling the 2DEG concentration in the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ double heterojunction structure and improving the electron mobility. This paper presents the analytical expression of 2DEG concentration n_s in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ double heterostructure. The effects of the thickness of the InGa_N insertion layer and the molar composition of indium on the 2DEG concentration, interface roughness scattering, random dipole scattering and total mobility are studied. According to the theoretical calculation results, on condition that the physical properties of the AlGa_N barrier layer remain unchanged, choosing the appropriate InGa_N barrier layer thickness and In molar composition concentration can better control the 2DEG concentration and carrier mobility. These results are beneficial to widely using the double heterojunction $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{N}/\text{GaN}$ in actual nitride based semiconductor devices.

Keywords: two-dimensional electron gases density, interface roughness scattering, random dipole scattering, polar optical phonon scattering

PACS: 72.10.-d, 72.20.Dp, 73.61.Ey

DOI: 10.7498/aps.70.20202223

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

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