

doi: 10.3969/j.issn.1001-2400.2011.05.024

AlGa_xN/GaN 异质结中二维电子气多子带解析建模

刘红侠, 卢凤铭, 王勇淮, 宋大建, 武毅

(西安电子科技大学 宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室 陕西 西安 710071)

摘要: 为了能够方便精确地研究 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结中二维电子气性质, 提出一种多子带二维电子气(2DEG)的解析模型。利用此模型能够求出 2DEG 能带、子能级、波函数和量子特性的解析解。通过模型计算还可以得到 2DEG 的分布变化、面电子密度、基带能级、费米能级和势阱随 Al 组分及 AlGa_xN 层厚度的改变。与泊松-薛定谔自洽求解结果相比较, 此模型能够给出精确的结论, 并避免了泊松-薛定谔自洽求解复杂的数值计算和耗时等缺点。

关键词: Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结; 二维电子气; 多子带模型; 能级分布

中图分类号: TN401 **文献标识码:** A **文章编号:** 1011-2400(2011)05-0176-07

Multiple sub-bands analytical model of 2DEG properties in Al_xGa_{1-x}N/GaN heterostructure

LIU Hongxia, LU Fengming, WANG Yonghuai, SONG Dajian, WU Yi

(School of Microelectronics, Xidian University, Key Laboratory of Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices, Xi'an 710071, China)

Abstract: To analyze a nitride heterostructure using a simple method, an analytic model is developed for AlGa_xN/GaN heterostructure to study two-dimensional electron gas (2DEG) properties. The model is analytical for the energy band, sub-band level and wave function of 2DEG. Comparison of the analytical results with the complex self-consistent results of Poisson-Schrodinger equation shows that the complicated numerical calculation and the disadvantage of time-consuming are avoided. We can obtain the variety of 2DEG distribution and sheet density and the shape of the potential well with Al content and thickness of AlGa_xN barrier layer using the analytic model.

Keywords: AlGa_xN/GaN heterostructure, 2DEG (two-dimensional electron gas), multiple sub-bands model, distribution of energy level

Al_xGa_{1-x}N/GaN 宽禁带半导体异质结构以其优越的物理和化学性质, 成为研制高温、高频、大功率、辐射电子器件最有潜力的半导体材料体系。Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构材料生长和相关器件研制已成为当今国际研究热点领域, 具有极为重要的科学意义和应用价值。GaN 基材料的制备和器件应用领域已经取得很大进展。例如, 在蓝宝石衬底上制出 GaN 基 PN 结蓝光发光二极管、GaN 材料的 MESFET, GaN 基材料激光器^[1]、AlGa_xN/GaN 异质结构 HEMT^[2], GaN 基量子阱和超晶格等。

随着材料结构及相关器件应用的深入, 需要以理论研究为基础对其进行结构或性能的优化。针对这种材料及器件人们也进行了一些理论研究^[3], 但是传统意义上多采用自洽求解泊松-薛定谔方程法, 这种方法

收稿日期: 2010-08-27

网络出版时间: 2011-4-27 17:19:01

基金项目: 国家自然科学基金重点基金(基金号: 60976068, 60936005); 教育部科技创新工程重大项目培育基金(基金号: 708083);

作者简介: 刘红侠, 女, 教授, 博导, E-mail: hxliu@mail.xidian.edu.cn.

网络出版地址: http://www.cnki.net/kcms/detail/61.1076.TN.20110427.1719.201105.176_024.html

虽然精确但是计算复杂、耗费时间。本文针对生长在蓝宝石(c-Al₂O₃)衬底上的 Ga 面 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构,对其能带、二维电子气分立能级、波函数进行了多子带解析建模,避免了自洽求解泊松-薛定谔方程的缺点。给出了不考虑弛豫影响的情况下, Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构中二维电子气的分布和面密度、基态能级、费米能级和势阱形状随 Al 组分及 AlGa_xN 层厚度的变化关系。

1 解析模型的建立

为了方便研究 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质界面二维电子气的有关性质,采用解析式(1)给出的势阱进行近似,异质结界面处电势可以看作近似线性增加,这种势阱仅由势阱深度 V_0 和异质界面处电场的垂直分量 F_{\perp} 两个参数决定,通过对 V_0 、 F_{\perp} 与基态、第一子带、第二子带波函数及能级解析式的确定,完成 AlGa_xN/GaN 异质结中二维电子气多子带解析模型。

$$V(Z) = \begin{cases} \infty & (Z < 0) \\ -V_0 \exp(-\frac{ZF_{\perp}}{V_0}) & (Z_{\max} > Z > 0) \end{cases} \quad (1)$$

其中, Z 为到异质结界面的距离, Z_{\max} 为 AlGa_xN 层厚度与 GaN 层厚度之和。势阱深度 V_0 可用式(2)表示^[4],

$$V_0 = -k_0 T \ln \left(\frac{N_D}{N_C} \right) + \frac{\pi \hbar^2}{m^*(x)} n_s(x) + \left(\frac{9\pi \hbar e^2}{8\epsilon_0 \sqrt{8m^*(x)}} \times \frac{n_s(x)}{\epsilon(x)} \right)^{2/3} \quad (2)$$

二维电子气面密度 $n_s(x)$ 为:

$$n_s(x) = \frac{+\sigma(x)}{e} - \left(\frac{\epsilon_0 \epsilon(x)}{de^2} \right) \times [e\Phi_b(x) + E_F(x) - \Delta E_C(x)] + N_D (d - d_i)^2 / (2d) \quad (3)$$

(3)式中, x 为 Al 组分, $\sigma(x)$ 为界面极化电荷^[5], $e\Phi_b(x)$ 为肖特基接触势, $E_F(x)$ 为费米能级^[6], $\Delta E_C(x)$ 为导带偏移量^[7,8]。

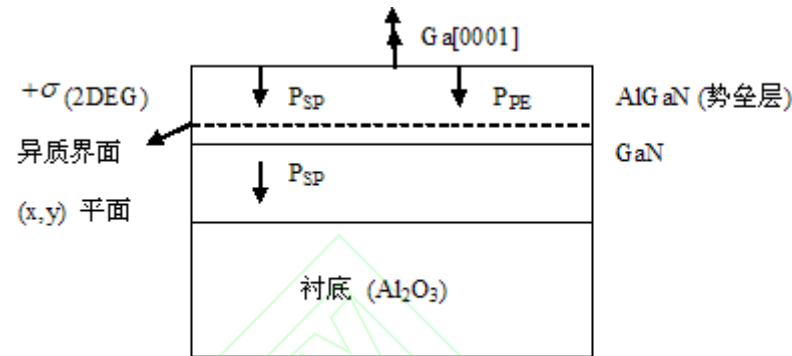


图1 AlGa_xN/GaN 异质结构与极化效应

对于张应变,自发极化方向与压电极化方向平行,总极化为二者之和,即 $P = P_{SP} + P_{PE}$,图1给出了 AlGa_xN 势垒层为张应变时的 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构中自发极化 P_{SP} 和压电极化 P_{PE} 及方向。Al_xGa_{1-x}N 禁带宽度为:

$$E_g(x) = [xE_g(AlN) + (1-x)E_g(GaN) - x(1-x)]eV = [6.13x + 3.42(1-x) - x(1-x)]eV \quad (4)$$

异质介面处电场的垂直分量 F_{\perp} 可用式(5)表示,

$$F_{\perp} = \frac{V_0}{Z_0} \quad (5)$$

其中, Z_0 为本征距离, 可以由无量纲的形状控制参数 λ [9] 给出:

$$\lambda = \frac{(2m^*eV_0)^{1/2}}{\hbar} z_0 \quad (6)$$

当势阱(例如 V_0 和/或 Z_0) 较大时 λ 较大, 对不同的材料 λ 的值变化范围较大, 通过与现有的 AlGaIn/GaN 异质结势阱实验数据进行拟合, 得到 $\lambda=15.35$ 。

由薛定谔方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - eV_0 \exp\left(\frac{-z}{Z_0}\right) \right] \psi = E\psi \quad (7)$$

其中, $\hbar = h/2\pi$, E 为能量本征值, ψ 为波函数。

将电子的状态看作 x 和 y 两个方向上的二维布洛赫波与 z 方向上的一维波包的乘积, 则在 (x,y) 平面内薛定谔方程可简化为:

$$-\left[\frac{d^2}{dz^2} + \exp\left(-\frac{z}{\lambda}\right) \right] \psi = \varepsilon\psi \quad (8)$$

ψ 仅是归一化距离 z 的函数; 无量纲参量 ε 和无量纲坐标 z 的表达式分别为:

$$\varepsilon = \frac{E}{eV_0} \quad (9)$$

$$z = \frac{\lambda}{Z_0} Z \quad (10)$$

由于假设异质结介面处势垒可以无限增加, 则其边界条件可以写为:

$$\psi(0) = \psi(\infty) = 0 \quad (11)$$

方程(8)的波函数解为超几何函数(分数贝塞尔函数), 在作跃迁矩阵元的计算时仍是十分复杂的, 采用近似的变分波函数代替:

$$\psi_0(z) = \left(\sqrt{\frac{c_0^3}{2}} \right) z \times \exp\left(-\frac{c_0 z}{2}\right) \quad (12)$$

$$\psi_1(z) = K_1 [z + a_1 z^2] \exp\left(-\frac{c_1 z}{2}\right) \quad (13)$$

$$\psi_2(z) = K_2 [z + a_2 z^2 + b_2 z^3] \exp\left(-\frac{c_2 z}{2}\right) \quad (14)$$

系数 K_1 、 K_2 可由波函数归一条件得到, 参数 c_0 、 a_1 、 c_1 、 a_2 、 b_2 、 c_2 可通过变分求能量极小值

$$-\int_0^{\infty} \psi_n^* H \psi_n dz = \int_0^{\infty} -\psi_n \left[\frac{d^2}{dz^2} + \exp\left(\frac{-z}{\lambda}\right) \right] \psi_n dz \quad (15)$$

以及利用波函数式(12), (13)和(14)之间的正交性

$$\int_0^{\infty} \psi_n^* \psi_m dz = \delta_{m,n} \quad (16)$$

加以确定。在此过程中, 相应的能量本征值也已得到。如此得到的能量仅仅是参数 λ 的函数。利用变分波函数及变分求能量极小值可以得到子带能级^[10]。

2 结果与讨论

2.1 解析结果与泊松-薛定谔自洽求解结果的比较

图2给出了室温($T = 300K$)下 AlGaIn 层厚度为 25nm, GaN 层厚度为 100nm, Al 组分为 0.3 时的势阱图形。analytical V_z 是用解析模型求得的势阱形状, self-consistent V_z 为泊松-薛定谔自洽求解得出的势阱形状。

其中 analytical $V_0 = -0.4965eV$, self-consistent $V_0 = -0.4876eV$; 从图中看出自洽势和模型势在势阱底部能够很好的符合。

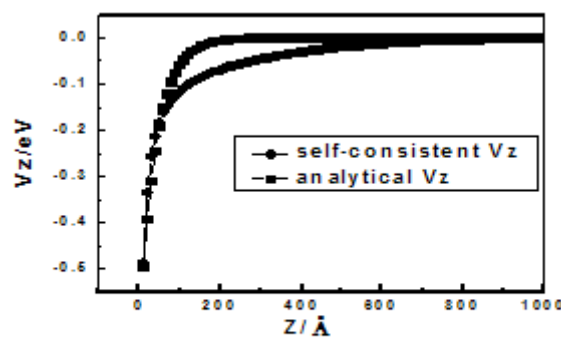


图2 模型势与自洽势分布的比较

图3给出了解析模型的波函数与自洽求解波函数所得结果的比较。其中 ψ_0 为基态波函数、 ψ_1 为第一子带波函数、 ψ_2 为第二子带波函数, 图3(a)、3(c)和3(e)为解析模型求解结果, 图3(b)、3(d)和3(f)为自洽求解泊松-薛定谔方程得到的结果。由于在势垒区, 电子能量 E 小于势垒高度 V_0 , 电子波矢为虚数, 波函数随距离按指数方式衰减。在图中给出的是室温下, AlGaIn 层厚度为 25nm, Al 组分为 0.3 时的波动情况。其中解析波函数从 AlGaIn/GaN 异质界面开始波动, 自洽波函数从势垒层顶部开始波动。

从图中可以看出, 解析波函数的峰谷与泊松-薛定谔自洽求解波函数的峰谷的相对位置(解析波函数位置加上 25nm 即为相对于自洽波函数的位置)几乎相同, 又在空间某一点电子出现的概率与波函数在该点的强度成正比, 在此物理意义上, 解析结果能够跟自洽结果很好的符合。在散射问题中, z 向波函数作为完整的波函数的一部分, 和 (x,y) 平面的波函数一起决定电子和声子以及其它散射^[11]之间的耦合, 从而确定运输特性。

通过对解析计算结果和较精确但计算方法复杂的泊松-薛定谔方程自洽结果进行分析比较, 可知这种解析模型避免了纯数值性自洽求解方法计算复杂、耗时长且能够简单快捷精确的计算出二维电子气势阱中波函数及相应量子性质, 大大简化了对实际应用材料分析的复杂程度。

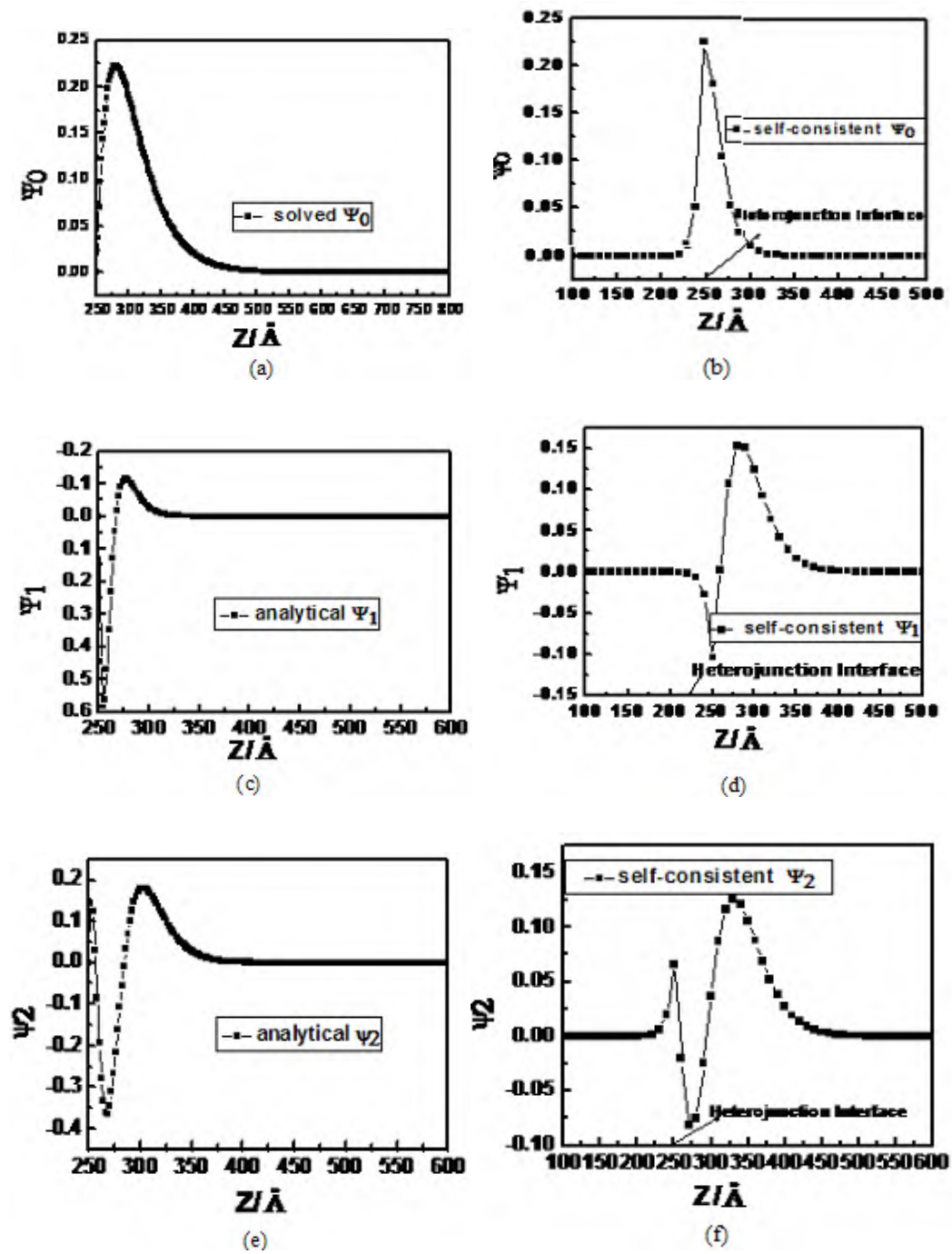


图3 解析模型波函数与自洽求解波函数所得结果的比较

- (a) 解析模型求解得到的基态波函数, (b)自洽求解泊松-薛定谔方程得到的基态波函数,
 (c) 解析模型求解得到的第一子带波函数, (d)自洽求解泊松-薛定谔方程得到的第一子带波函数,
 (e) 解析模型求解得到的第二子带波函数, (f)自洽求解泊松-薛定谔方程得到的第二子带波函数结果。

2.2 解析模型求解结果分析与讨论

本节讨论了势阱中的能级分布特性以及 Al 组分和 AlGaN 势垒层厚度对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结中 2DEG 特性的影响, 给出了势阱中的分裂能级以及势阱形状、面电子密度随 Al 组分和 AlGaN 势垒层厚度的变化关系。

由于量子效应, 势阱中的能带分裂成能级。图4给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中室温下 AlGaN 层厚

<http://www.xdxb.net>

度为 25nm, Al 组分为 0.3 ($x=0.3$) 时势阱中能级的分布的情况。从图中可以看出, 基态能级 $\varepsilon_0 = -0.1047eV$, 第一激发子带能级 $\varepsilon_1 = -0.0726eV$, 第二激发子带 $\varepsilon_2 = -0.0396eV$, 它们之间距离均大于 KT ($KT = 0.026eV$), 所以这三个分立能级都是存在的。在用解析模型求解过程中得到的子带能级是以势阱深度 ($V_0 = -0.4965eV$) 为参考的。

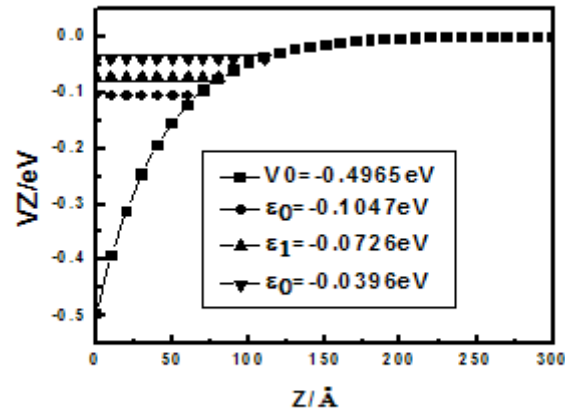


图4 势阱中的能级分布

在室温, 不同 AlGa_xN 层厚度 d ($d=10nm, 20nm, 30nm, 40nm$) 的情况下, Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构二维电子气浓度随 Al 组分的变化在图 5 中给出, 由于 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构体系的界面导带不连续性和极化效应与 Al_xGa_{1-x}N/GaN 势垒层中 Al 组分密切相关, 从而将影响 Al_xGa_{1-x}N/GaN 异质结构中二维电子气的性质。论文研究了 Al 组分对异质结构中二维电子气性质的影响。研究表明, 随着 Al 组分的增加, 自发极化和压电极化增强, 导带不连续性增大, 量子阱变深, 对二维电子气的限制作用增强, 因而二维电子气浓度增大。图 6 给出了不同 Al 组分 ($x=0.15, 0.25, 0.35, 0.45$) 情况下, 2DEG 面密度随势垒层厚度的变化情况。从图中可以看出, 随着势垒层厚度 d 的增加, 面电子密度也随之增加, 且面电子密度随 d 的增加几乎是线性的, 即对应于不同的组分 x 二维电子气密度随 AlGa_xN 层厚度的增加量是相同的。在实际情况下 Al 组分较高, AlGa_xN 层较厚时, 由于应变弛豫^[12]不可避免, 二维电子气密度不会上升的如此快, 根据实际情况, 可以在公式(3)中加入修正因子, 从而可以得到与实际情况更为接近的模型。

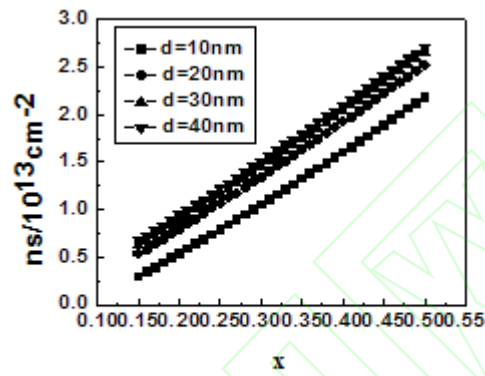
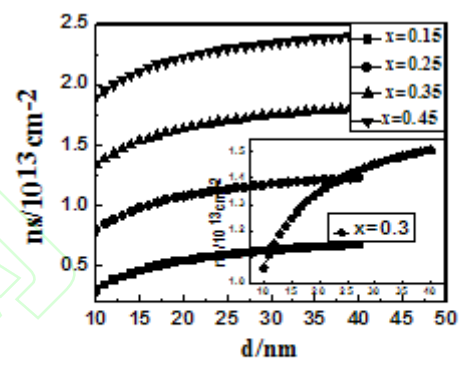


图5 二维电子气密度随 Al 组分的变化

图6 二维电子气密度随 AlGa_xN 层厚度的变化

3 结束语

论文针对生长在蓝宝石($c\text{-Al}_2\text{O}_3$)衬底上的 Ga 面 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构进行了解析建模,给出了能带、二维电子气子带能级、波函数的解析模型。将解析模型求解出的势阱深度,波函数与泊松-薛定谔方程自洽结果进行分析比较,验证了解析模型结果的正确性。当 Al 组分不低于 0.15 时,解析方法是对材料及器件应用进行分析的一种简单而且行之有效的方法,避免了纯数值性自洽求解泊松-薛定谔方程方法计算复杂、耗时长的缺点。

参考文献:

- [1] Lee S N, Cho S Y, Ryu H Y, et al. High-power GaN-based blue-violet laser diodes with AlGa_xN/GaN multiquantum barriers [J]. Appl. Phys. Lett., 2006, 88: 111101.
- [2] Xing H L, Dora Y, Chini A, et al. High breakdown voltage Al-GaN-GaN HEMTs achieved by multiple field plates [J]. IEEE Electron Dev Lett, 2004, 25: 161-163.
- [3] 王冲, 张金凤, 郝跃, 等. AlGa_xN/GaN HEMT 在 N₂ 中高温退火研究 [J]. 西安电子科技大学学报(自然科学版)2006. 33 (6): 862-865.
Wang Chong, Zhang Jin-feng, Hao Yue, et al. Study of AlGa_xN/GaN HEMT high temperature anneal in N₂ [J]. Journal of XIDIAN University (Natural Science) 2006. 33 (6): 862-865.
- [4] Ambacher O, Smart J, Shealy J R, et al. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_xN/GaN heterostructures [J]. J. Appl. Phys. 1999, 85: 3222.
- [5] Zhang Jin-Feng, Hao Yue. GaN-based heterostructures: electric-static equilibrium and boundary conditions [J]. CHINESE PHYSICS 2006, 15(10): 2402-2406.
- [6] Shur M S. GaN and related materials for high power applications [J]. Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1998, 483: 15-26.
- [7] Martin G, Strite S, Botchkarev A, et al. Valence - band discontinuity between GaN and AlN measured by x - ray photoemission spectroscopy [J]. Appl.Phys.Lett. 1994, 65: 610.
- [8] Martin G, Botchkarev A, Rockett A, et al. Valence - band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by x - ray photoemission spectroscopy [J]. Appl.Phys.Lett. 1996, 68: 2541.
- [9] Polonovski J P, Tomizawa K. Phonon Scatterings of Quasi Two-Dimensional Electron Gas in a Single Heterostructure [J]. J.J. Appl. Phys. 1985, 24: 1611-1618.
- [10] Kim M H, Shen L, Martinez T J, et al. Conformationally Controlled Chemistry: Excited-State Dynamics Dictate Ground-State Reaction [J]. Science, 2007, 315: 1561-1565.
- [11] Danzl J G, Haller E, Gustavsson M, et al. Quantum Gas of Deeply Bound Ground State Molecules [J]. Science, 2008, 321: 1062.
- [12] Tyagi R K, Ahlawat A, Pandey M, et al. An analytical two dimensional model for AlGa_xN/GaN HEMT with polarization effects for high power applications [J]. Micro-electronics Journal, 2007, 38: 887-883.