

AlGa_xN 势垒层应变弛豫度对高 Al 含量 Al_xGa_{1-x}N/GaN HEMT 性能的影响*

杨 燕 郝 跃 张进城 王 冲 冯 倩

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

摘要 采用数值算法自洽求解 Poisson 和 Schrödinger 方程, 计算了 AlGa_xN 势垒层的应变弛豫度对高 Al 含量 AlGa_xN/GaN 高电子迁移率晶体管 (HEMT) 中的导带结构、电子浓度以及二维电子气(2DEG)薄层电荷密度的影响. 利用所获得的精确薄层电荷密度与栅电压的关系, 采用非线性电荷控制模型解析求解了应变弛豫度对 Al_xGa_{1-x}N/GaN HEMT 直流输出特性的影响. 计算表明, 应变弛豫度为 0 时所获得的 Al_{0.50}Ga_{0.50}N/GaN HEMT 的最大二维电子气薄层电荷密度为 $2.42 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 最大漏电流为 2482.8 mA/mm; 应变弛豫度为 1 时所获得的最大二维电子气薄层电荷密度为 $1.49 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 最大漏电流为 1149.7 mA/mm. 模拟结果同已有的测试数据相比, 符合较好. 对模拟结果的分析表明, 对高 Al 含量的 AlGa_xN/GaN HEMT 进行理论研究时需要考虑应变弛豫度的影响, 减小 AlGa_xN 势垒层的应变弛豫度可显著提高器件的性能.

关键词 AlGa_xN/GaN 高电子迁移率晶体管 应变弛豫度

AlGa_xN/GaN HEMT 由于具有大的直接带隙能、高的饱和漂移速度、大的导带不连续性、良好的热稳定性以及强的自发和压电极化效应(可在 AlGa_xN/GaN HEMT 的沟道区域内获得非常高的自由载流子浓度), 从而在高频、高温和大功率应用方面具有比 Si 和 GaAs 基器件更大的优势 [1-4].

众多研究表明 [5,6], AlGa_xN/GaN HEMT 异质界面处的 2DEG 是决定器件特性的关键, 而高的 2DEG 密度与 Al 含量有很大的关系; Al 含量对导带的不连续性及极化效应有很大的影响, 提高 AlGa_xN 势垒层的 Al 含量可以获得大的导带不连续性以及强的极化效应. 然而, Al 含量的增大同时增大了 AlGa_xN 和 GaN 之间的晶格失配,

收稿日期: 2006-02-14; 接受日期: 2006-03-30

* 国家重大基础研究项目(973)(批准号: 51327020301)和国防预先研究项目(批准号: 41308060106)资助

使应力引发的压电极化电荷密度降低^[7],从而使实际器件性能相对有所下降.因此,为了进一步提高器件性能,非常有必要研究应变弛豫度对于高Al含量Al_xGa_{1-x}N/GaN HEMT性能的影响.

本文采用自洽方法耦合求解 Poisson 和 Schrödinger 方程,计算了应变弛豫度对 Al_xGa_{1-x}N/GaN HEMT 的导带结构、电子浓度以及 2DEG 薄层电荷密度的影响;采用非线性电荷公式描述了 2DEG 薄层电荷密度与栅压的精确关系,建立了能够精确模拟 AlGa_xN/GaN HEMT 直流特性的解析模型,分析了应变弛豫度对 AlGa_xN/GaN HEMT 直流特性的影响.模拟结果同已有的实验结果符合较好,为优化设计高 Al 含量 AlGa_xN/GaN HEMT 提供了一定的基础.

1 应变弛豫度对导带、电子浓度和 2DEG 薄层电荷密度的影响

为了研究应变弛豫度对 AlGa_xN/GaN HEMT 导带结构、电子浓度和 2DEG 薄层电荷密度的影响,本文采用自洽方法求解了 Poisson 和 Schrödinger 方程.其详细的公式描述如参考文献[8, 9].对于 AlGa_xN/GaN HEMT 的研究表明^[5],其良好的性能主要与高的薄层载流子浓度有关.而高的薄层载流子浓度除了与 AlGa_xN/GaN 异质结处大的导带不连续性有关外,还与极化效应(自发和压电极化)有较大的关系:在自发和压电极化效应的作用下,即使势垒层是无意识掺杂也可获得高的薄层载流子浓度.因此,为了能够正确描述 AlGa_xN/GaN HEMT 中 2DEG 薄层载流子密度与栅压的关系,就必须考虑极化效应的影响.本文将极化效应的影响包含在异质界面处的边界条件中.由于在异质界面处的电位移必须是连续的,因此异质结处边界条件定义如下:

$$\varepsilon_R \frac{dV_R}{dz} - \varepsilon_L \frac{dV_L}{dz} = P, \quad (1)$$

下标L和R分别代表异质界面的左侧和右侧, ε 为材料的介电常数, V 是电势, 总极化效应 $P = P_{sp} + (1-r)P_{pz}$, P_{sp} 为自发极化, P_{pz} 是压电极化, r 为 AlGa_x 是势垒层的应变弛豫度. Yu 等人的研究表明^[10], 非线性极化效应比线性极化效应更能正确地描述 AlGa_x 和 GaN 异质界面处极化效应的影响, 因此采用非线性表达式来描述自发和压电极化.

本文所采用的器件结构参数为^[2]: 器件栅长是 0.7 μm , 栅宽为 25 μm , 无意识掺杂的 Al_xGa_{1-x}N 帽层厚度为 2 nm, 掺杂浓度为 $2.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 的 Al_xGa_{1-x}N 掺杂层厚度为 15 nm, 无意识掺杂的 Al_xGa_{1-x}N/GaN 隔离层厚度为 3 nm 以及厚度为 2 μm 的 GaN 层.

为了说明应变弛豫度对器件的导带结构以及电子浓度分布的影响, 本文对 3 种不同情况下(应变弛豫度 r 分别为 0, 0.5 和 1.0) Al_{0.50}Ga_{0.50}N/GaN HEMT 的导带结构和电子浓度进行了对比(参见图 1 和 2). 可以看出, r 为 0, 0.5 和 1.0 时的势阱

深度分别是 -0.59 , -0.49 和 -0.39 eV, 势阱随应变弛豫度的减小变得更深, 二维沟道变得更窄, 量子限制更强. $r=1.0$ 时, 电子浓度较低, 约为 $4.42 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 电子浓度峰值距 AlGa_xN 和 GaN 所形成的异质界面的距离为 1.0 nm; $r=0.5$ 时, 电子浓度有所提高, 约为 $7.25 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 所获电子浓度峰值距异质界面的距离为 0.8 nm; $r=0$ 时, 电子浓度高达 $1.02 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, 所获电子浓度峰值距异质界

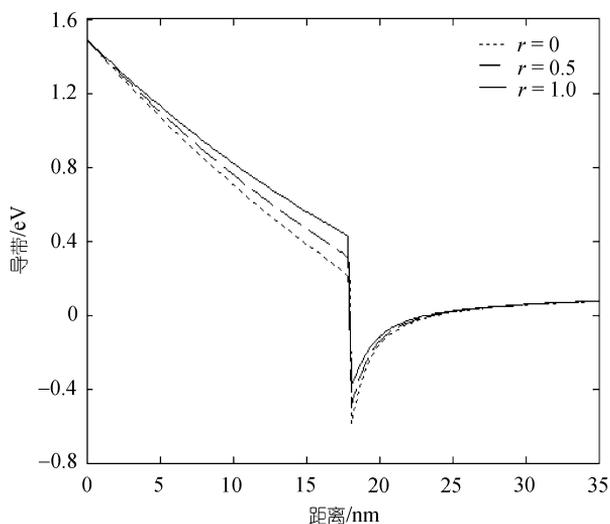


图1 不同应变弛豫度下 Al_{0.50}Ga_{0.50}N/GaN HEMT 导带图

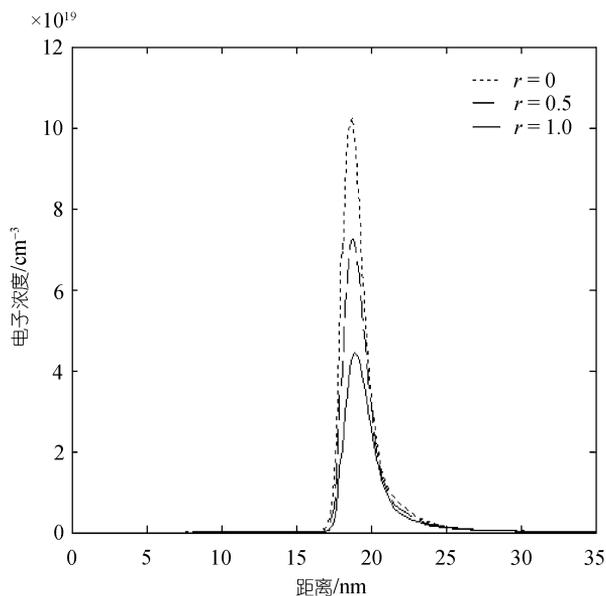


图2 不同应变弛豫度下 Al_{0.50}Ga_{0.50}N/GaN HEMT 电子分布

面的距离为 0.7 nm. 这表明 AlGaIn 势垒层应变弛豫度较小时, 具有强的量子限制, 有利于获得高的电子浓度.

图 3 是上述 3 种不同条件下, Al 含量 x 分别为 0.15, 0.25, 0.35 和 0.50 的 AlGaIn/GaN HEMTs 中 2DEG 薄层电荷密度随电压的变化关系. 图中 Al 含量为 0.25 时, 弛豫度为 0 的理论最大 2DEG 薄层电荷密度与实验测量值一致 [21]; Al 含量为 0.35 时, 最大 2DEG 薄层电荷密度的实验测量值 [21] 为 $1.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, 其与弛豫度为 0.48 的理论计算值一致; Al 含量为 0.50 时, 实验测量值 [21] 与弛豫度为 1.0 的理论计算值一致. 此外, 还可以看出, 当 Al 含量不变时, 最大 2DEG 薄层电荷密度随着应变弛豫度的增大而降低, 夹断电压随着应变弛豫度的增大而增大; 当应变弛豫度一定时, 最大 2DEG 薄层电荷密度随 Al 含量的提高而提高, 夹断电压随着 Al 含量的提高而降低. 从计算过程分析, 这主要是因为应变弛豫度的增大导致压电极化效应的影响变小, 而 Al 含量的增大则使得总极化效应的影响增强. 总的来说, 增大 Al 含量, 降低 AlGaIn 势垒层的应变弛豫度的影响则可获得高的

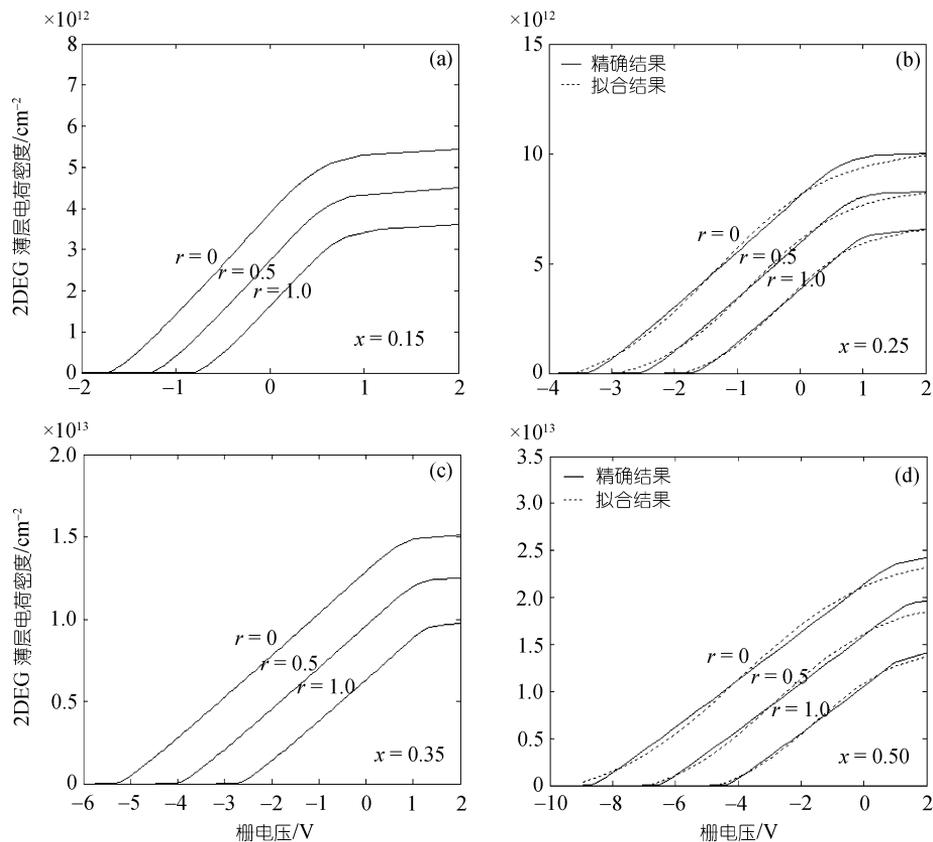


图 3 不同应变弛豫度下 AlGaIn/GaN HEMTs 中 2DEG 薄层电荷密度随电压的变化

2DEG 薄层电荷密度; 2DEG 薄层电荷密度对应变弛豫度的依赖性与 2DEG 薄层电荷密度对 Al 含量的依赖性相比, 其对应变弛豫度的依赖性更强.

2 应变弛豫度对器件直流特性的影响

为了能够较为准确地描述 2DEG 薄层电荷密度与栅电压的关系, 并且可采用解析的方式求解 AlGa_n/GaN HEMT 的器件特性, 本文采用下述公式描述图 3 中 2DEG 薄层电荷密度与栅电压的关系:

$$n_s(V'_{gs}) = n_{sm} \left\{ \alpha + (1 - \alpha) \tanh \left[\frac{(V'_{gs} - V_{gm})}{V_m} \right] \right\}, \quad (2)$$

其中, n_{sm} , V_{gm} , V_m 和 α 为拟合参数; $V'_{gs} (= V_{gs} - V(x))$ 为有效栅电压; V_{gs} 是栅电压, $V(x)$ 为沟道 x 处的沟道电势. 从图 3 可以看出, 关系式(2)可以较为理想地描述 2DEG 薄层电荷密度与栅电压的关系.

根据电流密度方程^[11]获得沟道中的漏-源电流为

$$I_{ds} = qWv(x)n_s(x), \quad (3)$$

其中, q 为电子电荷; W 是栅宽; $v(x)$ 为电子速度,

$$v(x) = \begin{cases} \frac{\mu_0 E(x)}{1 + \frac{(\mu_0 E_c - v_{sat}) E(x)}{E_c v_{sat}}} & E(x) < E_c, \\ v_{sat} & E(x) > E_c, \end{cases} \quad (4)$$

式中, $E(x) (= dV(x)/dx)$ 为沟道 x 处的电场, E_c 是关键电场, v_{sat} 为饱和速度.

对于较低的漏电压 V_{ds} (即 $V_{ds} < V_{dsat}$, V_{dsat} 为饱和电压)时, 电子速度并未达到饱和速度, 此时沟道中的电流如下:

$$I_{ds} = qWn_s(x)\mu_0 \frac{dV(x)}{dx} \left/ \left[1 + \frac{(\mu_0 E_c - v_{sat}) dV(x)/dx}{E_c v_{sat}} \right] \right. \quad (5)$$

对(5)式在 $x = 0(V(x) = I_{ds}R_s)$ 和 $x = L(V(L) = V_{ds} - I_{ds}R_d)$ 进行积分, 获得线性区电流为

$$I_{ds}L = (q\mu_0W\alpha n_{sm} - I_{ds}/E_1) [V_{ds} - (R_s + R_d)I_{ds}] - q\mu_0Z(1 - \alpha)n_{sm}V_m \ln A_1, \quad (6)$$

$$A_1 = \cosh \left(\frac{V_{gs} - V_{gm} - V_{ds} + I_{ds}R_d}{V_m} \right) \left/ \cosh \left(\frac{V_{gs} - V_{gm} - I_{ds}R_s}{V_m} \right) \right.,$$

其中, R_s 和 R_d 为源漏电阻, L 是器件的栅长.

随着漏电压的提高, 沟道中横向电场增大, 电子速度趋向于饱和值, 因此饱和区的漏电流可简单表示为

$$I_{ds} = qWv_{sat}n_{sm} \left[\alpha + (1-\alpha) \tanh \left(\frac{V_{gs} - V_{dsat} - V_{gm}}{V_m} \right) \right]. \quad (7)$$

由于线性区和饱和区的电流是连续的, 因此用 V_{dsat} 代替(6)式中的 V_{ds} , 并令(6)和(7)两式相等, 即可获得饱和漏电压 V_{dsat} 和饱和电流 I_{ds} . 为了考虑沟道调制效应的影响, 对于 $V_{ds} > V_{dsat}$, 将 2DEG 沟道分为两个区域: 低场区域 ($0 < x \leq L_1$) 和高场区域 ($L_1 \leq x \leq L$). 假设 $x = L_1$ 处的电势 $V(L_1)$ 为 V_1 , 则沟道中低场区的电流为

$$I_{ds} = \frac{qW\mu_0n_{sm} \left[\alpha(V_1 - I_{ds}R_s) - (1-\alpha)V_m \ln(B_1) \right]}{L_1 + (V_1 - I_{ds}R_s)(\mu_0E_c - v_{sat})/E_c v_{sat}}, \quad (8)$$

$$Q_1 = \cosh \left(\frac{V_{gs} - V_{gm} - V_s}{V_a} \right) / \cosh \left(\frac{V_{gs} - V_{gm} - I_{ds}R_s}{V_a} \right).$$

当 $x = L_1$ 时即速度达到了饱和速度, 则此处的漏电流可表示为

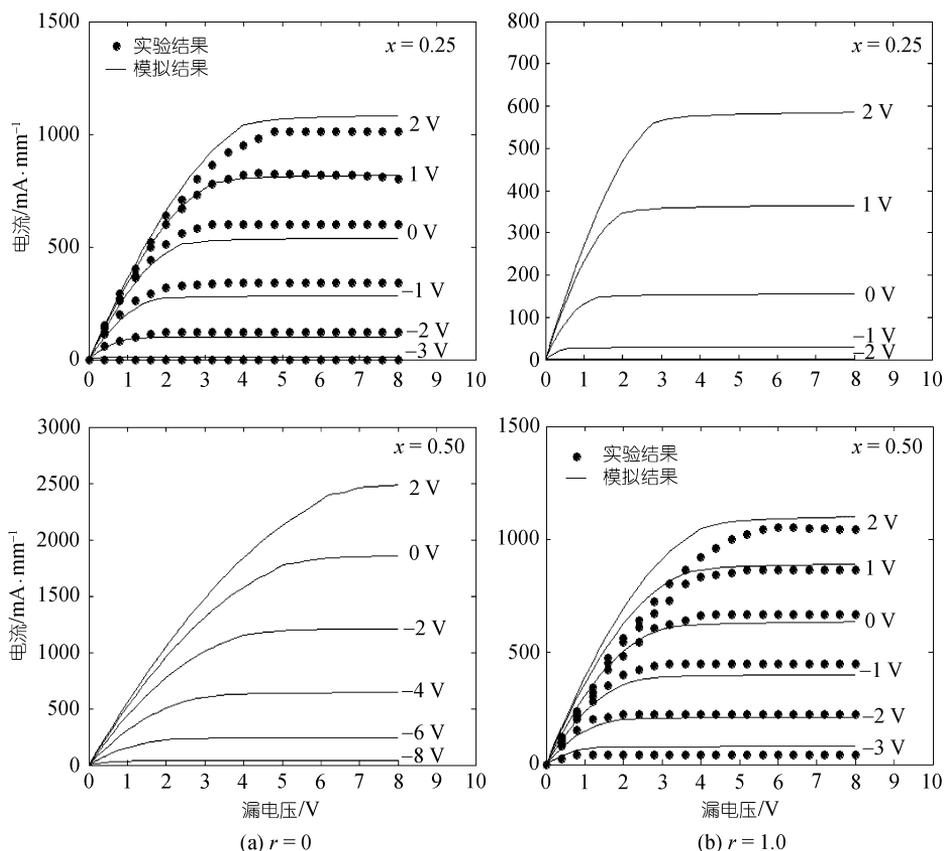
$$I_{ds} = qWv_{sat}n_{sm} \left[\alpha + (1-\alpha) \tanh \left(\frac{V_{gs} - V_1 - V_{gm}}{V_m} \right) \right]. \quad (9)$$

为了确定 L_1 和 V_1 , 在高场区求解二维 Poisson 方程即可获得 L_1 与 V_1 的关系式:

$$V_{ds} - I_{ds}R_d - V_1 = \frac{2dE_c}{\pi} \sinh \left[\frac{\pi(L - L_1)}{2d} \right], \quad (10)$$

其中, d 为 AlGaIn 势垒层厚度. 将(8)~(10)式联立求解可获得考虑沟道调制效应的饱和区电流.

为了更进一步说明弛豫度对 AlGaIn/GaN HEMTs 性能的影响, 并可与现有的实验结果^[2]作比较, 图 4 给出了 Al 含量较低 ($x = 0.25$) 和较高 ($x = 0.50$) 两种情况下, 考虑应变弛豫度和不考虑应变弛豫度条件下 AlGaIn/GaN HEMT 的直流特性. 可以看出, Al 含量为 0.25 时, 应变弛豫度 r 为 0 的理论结果与实验结果符合较好; Al 含量为 0.5 时, 应变弛豫度 r 为 1 的理论结果与实验结果符合较好. Al 含量为 0.5, 栅偏置电压为 2 V 时, 应变弛豫度 r 为 0 时所获得的最大漏电流较高, 约为 2482.8 mA/mm; 应变弛豫度 r 为 1.0 时所获得的最大漏电流较低, 为 1149.7 mA/mm. 计算表明, 对于 AlGaIn 势垒层厚度近似为 20 nm 的情况而言, Al 含量较低时, AlGaIn 势垒层是非弛豫的; 而当 Al 含量提高到一定的程度时, AlGaIn 势垒层就是完全弛豫的. 这与上面的分析是一致的, 进一步说明了在对高 Al 含量的 AlGaIn/GaN HEMT 性能进行理论研究时有必要考虑 AlGaIn 势垒层应变弛豫度的影响.

图 4 不同应变弛豫度下 AlGa_xN/GaN HEMT 直流输出特性

3 结论

本文采用自洽方法耦合求解 Poisson 和 Schrödinger 方程, 计算了应变弛豫度对高 Al 含量 AlGa_xN/GaN HEMT 的导带结构、电子浓度以及 2DEG 薄层电荷密度的影响; 采用非线性电荷公式描述 2DEG 薄层电荷密度与栅压的精确关系, 建立了能够精确模拟 AlGa_xN/GaN HEMT 直流特性的解析模型, 分析了应变弛豫度对 AlGa_xN/GaN HEMT 直流特性的影响. 结果表明, AlGa_xN 应变弛豫度对高 Al 含量的 AlGa_xN/GaN HEMT 器件性能有显著的影响, 降低应变弛豫度可显著提高器件的性能, 对高 Al 含量的 AlGa_xN/GaN HEMT 进行理论研究时需要考虑 AlGa_xN 应变弛豫度的影响. 模拟结果同已有的实验结果符合较好也表明了本文模型及结论的正确性.

参 考 文 献

- 1 Pearton S J, Zopler J C, Shul R J, et al. GaN: processing, defects and devices. *J Appl Phys*, 1999, 86(1): 1–78[DOI]
- 2 Wu Y F, Keller B P, Fini P, et al. High Al-content AlGa_N/Ga_N MODFET's for ultrahigh performance. *IEEE Electron Device Lett*, 1998, 19(2): 50–53[DOI]
- 3 Weimann N G, Manfra M J, Chakraborty S, et al. Submicron AlGa_N/Ga_N HEMT with very high drain current density grown by plasma-assisted MBE on 6H-SiC. *IEEE Electron Device Lett*, 2002, 23(12): 691–693[DOI]
- 4 Kumar V, Adesida I. AlGa_N/Ga_N HEMT on sapphire. Fourth IEEE International Caracas Conference on Device, Circuits and Systems, 2002, D048(17-19): 1–6
- 5 Maeda N, Nishida T, Kobayashi N, et al. Two-dimensional electron-gas density in Al_xGa_{1-x}N/Ga_N heterostructure field-effect transistors. *Appl Phys Lett*, 1998, 73(13): 1856–1858[DOI]
- 6 Chu R M, Zhou Y G, Zheng Y D, et al. Influence of doping on the two-dimensional electron gas distribution in AlGa_N/Ga_N heterostructure transistors. *Appl Phys Lett*, 2001, 79(14): 2270–2272[DOI]
- 7 Ambacher O, Foutz B, Smart J, et al. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGa_N/Ga_N heterostructures. *J Appl Phys*, 2000, 87(1): 334–344[DOI]
- 8 Vinter B. Subbands and charge control in a two-dimensional electron gas field-effect transistor. *Appl Phys Lett*, 1984, 44(3): 307–309[DOI]
- 9 Imanaga S, Kawai H. Novel AlN/Ga_N insulated gate heterostructure field effect transistor with modulation doping and one-dimensional simulation of charge control. *J Appl Phys*, 1997, 82(5): 5843–5858[DOI]
- 10 Yu T T, Brennan K F. Theoretical study of a Ga_N-AlGa_N high electron mobility transistor including a nonlinear polarization model. *IEEE Trans Electron Device*, 2003, 50(2): 315–323[DOI]
- 11 Sze S M. *Physics of Semiconductor Devices*. New York: Wiley, 1981. 337