AlGaN/GaN 材料 HEMT 器件优化分析与 I–V 特性

冯龙 王燕 李志平 田立林

（清华大学微电子学研究所，北京 100084）

摘要：在考虑 AlGaN/GaN 异质结中的压电极化和自发极化效应的基础上，自洽求解了垂直于沟道方向的薛定谔方程和泊松方程，通过模拟计算，研究了 AlGaN/GaN HEMT 器件掺杂层 Al 的组分、厚度、施主掺杂浓度以及栅偏压对二维电子气特性的影响，用准二维物理模型计算了 AlGaN/GaN HEMT 器件的输出特性，并给出了相应的饱和电压和阀值电压，并对计算结果和 AlGaN/GaN HEMT 器件的结构优化进行了分析。

关键词：AlGaN/GaN；HEMT；二维电子气；输出特性

PACC：7340N；7360L

中国分类号：TN 325.3 文献标识码：A 文章编号：0253-4177(2004)10-1285-06

1 引言

III–V族氮化物是近几年兴起的宽带隙半导体材料，这些宽禁带半导体具有较高的击穿电压、电子漂移速度和很强的抗辐射能力，被看作是发展短波长光电子器件以及高温、高频、大功率电子器件的优选材料。已成为当前国际研究热点之一。AlGaN/GaN 异质结是发展氮化物电子器件最重要的也是最基本的结构。AlGaN/GaN 材料的二维电子气和器件研究中出现了一些新的不同于其他 III–V 族材料的问题，有待进一步研究。例如，界面极化电荷对二维电子气浓度和分布有影响；强极化电场的存在会影响栅电压对二维电子气的调控能力；异质结材料中的应变常常会诱导产生许多深能级中心，从而影响到二维电子气浓度等等。这些问题可以通过对 AlGaN/GaN 异质结的优化设计来解决。研究分析 AlGaN/GaN 异质结界面二维电子气的浓度和分布以及输运性质对发展异质结电子器件具有重要的意义。

本文首先考虑 AlGaN/GaN 异质结中的压电极化和自发极化效应，自洽求解了垂直于沟道方向的薛定谔方程和泊松方程，通过模拟，对 AlGaN/GaN 材料 HEMT 器件进行优化分析，研究了 Al 的含量、势垒层厚度、隔离层厚度和掺杂浓度、栅偏压等对二维电子气浓度和饱和度的影响。此外，我们用准二维物理模型计算了 AlGaN/GaN 材料 HEMT 器件的输出特性，并给出了相应的饱和电压和阀值电压。

2 器件性能的优化分析

AlGaN/GaN 材料 HEMT 器件结构如图 1 所示。我们将从四个方面来分析各种器件参数对二维电子气浓度的影响，最后讨论 AlGaN/GaN HEMT 器件的优化方案。

2.1 势垒层 Al 的组分对二维电子气的影响

作为新型的电子功能材料，AlGaN/GaN 最突出的特点是能够在界面处形成高密度的极化电荷，这些极化电荷即使在势垒层掺杂浓度很低或不掺杂时，也能在界面处得到很高的二维电子气浓度。我们考虑沿 [0001] 方向的 GaN 层上异质外延薄的 Al GaN 层，假定其厚度小于临界厚度，则材料失配在

* 国家重点基础研究专项基金资助项目（批准号：2002CB311907）

© 2004 中国电子学会

2003-09-27 收到，2003-11-03 定稿
界面处极化电荷的大小与AlGaN 中Al 的含量有直接关系. 图 3 给出了 Al 组分 x 从 0.2 到 0.8 变化过程中, 极化面电荷密度与二维电子气面密度的变化趋势. 其他的结构参数如下: AlGaN 堆垒层厚度为 20nm, 施主掺杂浓度为 1.5×10^{16} cm^{-2}, AlGaN 隔离层为 3nm, GaN 层为 2μm, GaN 材料的背景电子浓度为 10^{16} cm^{-3}. 可以看出当 x = 0.2 时, AlGaN/GaN 二维电子气面密度就已经达到 10^{13} cm^{-2} 以上, 同时计算得到的电子分布的半高宽为 1.56nm, 比相同结构的 AlGaaS/GaAs 系统小一个数量级10. 这主要是堆垒层中的压电极化场和自发极化电场对异质结电荷的强烈调制作用以及异质结界面较大的导电不连续所致. 随着 x 的增加, 极化面电荷显著增加, 使得二维电子气面密度也随之增加. 但是 Al 的含量越高, 级格失配引起的材料应变会诱发很多深能级中心, 它们会俘获电子使得二维电子气浓度反而下降, 迁移率也会随之下降, 同时, 界面处强的极化电场也会减小栅对二维电子气的控制能力, 从而降低器件的性能. 因此从器件制作角度来说, x 的范围一般选在 0.2~0.45 之间. 当 x 小于 0.15 时由于导带边的能量不连续值较小, 很难形成 AlGaN/GaN 异质结; 而大于 0.45 时由于晶格失配较大, 工艺上很难实现, 器件性能也会退化. 可见, 控制好 AlGaN 中的 Al 组分, 而不是平面追求二维电子气浓度, 是优化的一个重要步骤.

![图 3 二维电子气面密度随 Al 组分的变化](image)

Fig. 3 Dependence of 2DEG sheet density on Al composition

2.2 指垒层厚度对二维电子气的影响

当栅上加电压时, AlGaN 堆垒中耗尽层的宽度将发生变化, 从而会改变二维电子气的分布. 因此堆垒层的厚度对二维电子气的性能也有很大的影响.

![图 2 Al 组分 x = 0.31 时导带图和二维电子气浓度分布](image)

Fig. 2 Conduction band and 2DEG distribution when Al mole fraction x = 0.31
我们固定 2.1 节中的各种器件参数，只改变势垒层厚度，得到图 4 所示的计算结果。可以看出，当势垒层厚度从 4nm 增加到 40nm 时，对不同 x 值的结构，二维电子气面密度将会增加一个数量级。而且随着 x 的增加，二维电子气浓度增加幅度会快速得多。这和图 3 所示的结果一致，反映出 x 的影响更突出一些。

图 4 二维电子气面密度随势垒层厚度的变化
Fig. 4 Dependence of electron sheet concentration on barrier width

对于每一条曲线来说，随着势垒层厚度的增加，二维电子气浓度增加逐渐变缓，而厚度越大，浓度增加得越慢，有饱和的趋势，这是由极化效应产生的。势垒层厚度增加到一定程度，接近极化正电荷时，电子气和极化正电荷相互抵消，量子阱不再随着势垒层的增大而下降，使电子气浓度饱和。如果再继续加厚势垒层，可能会出现势垒层耗尽的情况，这时势垒层中的自由载流子会屏蔽施加电压对二维电子气的控制。在器件设计中要避免这一现象，保证势垒层完全耗尽。而且势垒层的厚度超过其临界厚度，晶格弛豫会在界面处产生高浓度的位错，影响器件的电学特性。

从前面的计算中还发现，无论是电子的波函数还是电子的密度分布都已从沟道延伸到左侧的势垒层中，如图 2 所示。且电子的峰值电荷不出现在异质结界面处，而是在界面以内较小的距离内，这是量子力学效应的直接结果。为了降低势垒层中电子耗散，提高电子的迁移率，通常在界面处增加一层薄的不掺杂的势垒隔离层。在 AlGaAs/GaAs 系统中，由于 2DEG 主要来源于势垒层中调制掺杂效应，因此随着隔离层厚度增加，电子穿越势垒到达势阱的机会减小，也就是说，2DEG 的面密度随隔离层厚度的增加而减小[13]。对于 AlGaAs/GaAs 系统空间隔离层厚度与势垒中电子面密度的变化关系目前尚未见系统地研究。我们首次对这个问题进行了计算。图 5 给出了势垒层 Al 含量为 0.31，厚度为 20nm，掺杂浓度为 1.5×10^{19} cm^{-3} 时，只改变隔离层厚度时，二维电子气面密度的变化。可以看出随着隔离层厚度增加，二维电子气浓度增加，这和 AlGaAs/GaAs 材料的情况正好相反，因为两者产生二维电子气的主要机理有所不同。AlGaAs/GaAs 系统极化电荷效应是 2DEG 的主要来源，从图 2 可以看到由于极化电场的存在，电子进入到 GaN 势阱中不再需要越过一个隔离层势垒，而且由于隔离层不掺杂，其中的电场为常数，因此随着隔离层厚度增加，降到上面的电压会增加。根据图 2 可知这将使电子势阱的深度增加，从而二维电子气面密度也会增加。计算同时表明，随着隔离层厚度的增加，电子分布的半高宽会略微减小，这些对提高 HEMT 器件的性能是有益的。但是从器件设计的角度来看，隔离层的厚度也不能一味地增加，因为总的势垒厚度受到了临界厚度的限制。所以为了在制作 AlGaAs/GaAs HEMT 器件时隔离层的厚度是一个重要的优化参数。

图 5 隔离层厚度不同时二维电子气面密度
Fig. 5 Dependence of 2DEG sheet density on different widths of spacer layer

2.3 势垒层施主浓度对二维电子气的影响

我们固定势垒层厚度为 20nm，改变施主浓度，观察二维电子气的变化趋势，结果如图 6 所示。随着掺杂的施主浓度的增加，二维电子气浓度也增加，但增加的幅度并不太大，而 Al 含量 x 的变化导致的二维电子气面密度的增加，远远大于掺杂浓度带来的影响。这个现象说明，对二维电子气起决定作用的不是势垒层中的施主浓度，而是异质结界面处的极化电荷。这一结果与 2.1 节中讨论的结果一致。
3 准二维方法模拟 I-V 特性

众所周知，器件的物理模型对理解器件的特性和进行器件设计十分重要。器件模拟可以是一个理论和实践的工具。我们选用准二维的方法，对 AlGaN/GaN 材料 HEMT 器件的 I-V 特性进行模拟。这种方法的优点包括：

- 式中 $W$ 是沟道宽度；$x$ 是电子的迁移率；$n_e$ 是二维电子气浓度，用前向自洽求解得到的电子浓度积分求得，它是沟道位置 $z$ 和栅压的函数。
- 我们在模拟中考虑了电场饱和效应，它是沟道中位置的函数，

$$ v(z) = \frac{\mu_0 E(z)}{1 + \frac{E(z)}{E_{sat}}} $$

其中 $\mu_0$ 为迁移率；$E(z) = -\frac{dV(z)}{dz}$ 是沟道中的电场，用前向自洽求解得到的电势求微分得到；$E_{sat} = \frac{2E_{sat}}{\mu_0}$ 是饱和电场，$E_{sat}$ 为饱和速度。

图 8 是当 $x = 0.2$，势垒层厚度为 30nm 时得到的模拟结果。图中可以看到，饱和电流的饱和速度为 $2.5 \times 10^3 \text{cm/s}$，迁移率为 $1500 \text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$，源端与主体电阻都是 $\Omega$，沟道长为 $1.5 \mu\text{m}$，宽为 $60 \mu\text{m}$。通过图中连续曲线的左侧，曲线右侧是饱和区。图中可以看出，在不加栅压的情况下，源漏电压增加到 $3.3 \text{V}$，器件出现饱和，随着栅压的增加，器件更容易出现饱和。此外，移动还可以得到器件的开启电压 $V_s$ 大约在 $6 \text{V}$. 如果 $x = 0.4$，开启电压超过了 $10 \text{V}$。可见 AlGaN/GaN 导电电压和开启电压都比较高，而且随着 $x$ 的增加而显著增加，这从另一方面证明了在器件设计时 $x$ 的取值不能太大。
4 结论

计算结果表明 AlGaN/GaN 二维电子气的特性受器件结构的影响而灵敏地变化，这就需要进行器件优化设计。对于 AlGaN/GaN HEMT 器件来说，很高的二维电子气浓度主要由界面处的极化电场引起，势垒层中的施主浓度和厚度的影响相对要小一些，优化设计中可以放在次要位置进行考虑。二维电子气随着 Al 的组分 $x$ 的增加而显著增加，为此控制好 Al 的组分就能够很大程度上控制二维电子气浓度。但是随着 $x$ 的增加，晶格失配引起的材料应变会诱生很多深能级中心，它们会俘获电子，使得二维电子气浓度反而下降，同时，界面处的极化电场也会减小栅对二维电子气的控制，从而降低跨导。增加势垒层和势垒隔离层的厚度，可以增加二维电子气的浓度，但是同时也会降低栅对沟道的控制能力；反之，减小势垒厚度，有利于栅压对沟道电流的控制，增加跨导。但是二维电子气的浓度也会下降。从模拟得到的输出特性可以看出，饱和电压和开启电压都比较高，而且随着 $x$ 的增加而增加。因此在 AlGaN/GaN HEMT 器件的优化设计中，不能只强调增加二维电子气的浓度，而是需要兼顾各方面的因素。

参考文献

AlGaN/GaN HEMT Device Optimization and I–V Characteristics

Ma Long, Wang Yan, Yu Zhiping and Tian Lilin

(Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Self-consistent solution of Poisson–Schrödinger equation along vertical direction of channel is obtained, which is taken account of spontaneous and piezoelectric polarization in AlGaN/GaN heterojunction. The dependence of 2DEG characteristics on the Al mole fraction, the thickness of each layer, the donor concentration, and the gate voltage are investigated through simulation, respectively. The output characteristics using quasi-2D model are simulated, saturation voltage and threshold voltage are also shown, and the explanation and analyse are given.

Key words: AlGaN/GaN; HEMT; 2DEG; output characteristics

PACC: 7340N; 7360L


* Project supported by the Special Funds of National Key Basic Research Plan of China(No. 2002CB31190)

Received 27 September 2003, revised manuscript received 3 November 2003 © 2004 The Chinese Institute of Electronics