

國立清華大學 電機工程學系

實作專題研究成果摘要

Epitaxial Effects on 2DEG Density and
Mobility in GaN HEMTs

異質磊晶對 GaN HEMT 中 2DEG 濃度
與遷移率之影響

專題領域： 電子領域

組 別： B606

指導教授： 黃敬源 副教授

組員姓名： 陳信睿

研究期間： 2025年2月至 2025年12月止，共11個月

目錄

目錄	i
摘要	ii
1. 研究背景與目的	1
2. 研究方法	2
2-1. 理解 AlGa _N /Ga _N 異質介面處 2DEG 的機制	2
3. 研究結果	3
4. 結論	5
研究心得	6
附錄. 參考文獻.....	6

摘要

本研究針對六片具不同異質磊晶 (hetero epitaxy) 設計之 AlGaIn/GaN HEMT 晶圓進行量測，探討結構參數對二維電子氣 (2DEG) 濃度與遷移率之影響。這些晶圓的主要差異來自於 top spacer 與 bottom spacer 的鋁組成比率 (Al composition)，以及 AlGaIn barrier 的鋁組成比率與厚度。藉由不同結構之間量測比較搭配文獻研究，可得出各層磊晶結構對 2DEG 的主要增益與限制機制，建立一套異質接面設計對電子傳輸特性的分析架構。

在 AlGaIn/GaN HEMT 中，2DEG 的濃度與遷移率是決定元件輸出電流與導通電阻核心參數。然而電子遷移率會受到多種散射機限制制，包括光學聲子散射 (optical phonon scattering)、合金無序散射 (alloy disorder scattering) 以及界面粗糙散射 (interface roughness scattering)；2DEG 的濃度與遷移率同時也會受到 AlGaIn barrier 中鋁組成比率以及 barrier 厚度的影響。

本研究結果顯示，增加 AlGaIn barrier 的鋁組成比率或厚度會強化極化 (polarization) 與能帶不連續性，使 GaN 通道中的 2DEG 濃度上升，然而伴隨而來的波函數上移與合金散射將會使電子遷移率呈現下降的趨勢。同時與其他晶圓比較後可以發現，引入極薄的 AlN bottom spacer 能夠增益 2DEG 電子遷移率，同時因更強的極化效應而帶來少量的 2DEG 電子濃度增益。

綜合而言，本研究證實異質磊晶結構 (鋁組成、barrier 厚度以及 spacer 的有無與構成) 皆會對 2DEG 的形成機制與散射行為產生關鍵影響。本研究建立並歸納了能帶、散射機制與極化效應三者對 2DEG 特性的增益與補償機制，可作為未來提升 GaN HEMT 電流密度、降低導通電阻、提升元件性能的參考。

1. 研究背景與目的

AlGaIn/GaN 異質結構因具有高遷移率與高漂移速度的二維電子氣 (2DEG, Two-Dimensional Electron Gas) 以及在高頻、高功率電子元件應用中的強大潛力，在過去十幾年廣受學界與業界的關注。已有許多研究團隊提出由多種不同材質組合與鋁組成比例的氮化物堆砌而成的 HEMT，甚至已經有能在單一元件中形成一層或兩層以上高濃度 2DEG 的 HEMT 存在。儘管技術已取得顯著進展，但在 2DEG 的形成機制、散射行為以及多層磊晶結構相互之間的影響、並對其電性的調控方面，仍有許多值得深入探討之處。

AlGaIn/GaN 異質結構因在其異質接面處具有高遷移率與高飽和漂移速度的二維電子氣 (2DEG)，以及在高功率電子元件領域中展現出的優異性能，譬如熱穩定性與擊穿耐受能力，過去十餘年來一直是學術界與產業界研究的核心焦點之一。特別是在功率元件如 GaN HEMT 的發展中，2DEG 的電性表現可以說直接決定了元件的導通電阻、電流密度、崩潰電壓與整體能效，因此深入理解其形成機制以及其與晶圓磊晶結構之間的連動影響將是優化元件性能的關鍵。

故，本研究面向於探討，對於 AlGaIn/GaN HEMT 而言：

1. 有無 bottom spacer 或是改變其成分組成將會對元件的電性造成何種影響
2. 改變 AlGaIn barrier 的厚度或是成分組成將會對元件的電性造成何種影響
3. 各層結構對於元件電性而言起到了何種增益或是補償作用

本研究將對六片具有不同磊晶設計的晶圓進行量測與分析，分別萃取其 2DEG 濃度隨溫度變化的行為，以及 2DEG 遷移率與溫度之間的關係。透過比較不同晶圓的量測結果，可評估各層磊晶結構（如鋁組成、barrier 厚度、spacer 設計等）對 2DEG 特性所造成的變化幅度。再結合文獻資料釐清其背後的作用機制，得以構建出一套用於理解並優化 AlGaIn/GaN HEMT 電性表現的分析藍圖，作為未來元件設計的參考。

2. 研究方法

HEMT (High Electron Mobility Transistor) 是 HFET (Heterostructure FET) 的其中一種分支，其繼承了利用異質結構堆砌的特色，是能夠在異質介面處產生高濃度、高遷移率的二維電子氣 (2DEG) 的場效晶體管 (FET)。

可以說，2DEG 是 HEMT 的核心。只要充分了解 2DEG 的濃度與遷移率，就可以對元件性能進行判斷，甚至可以在設計之前就先行預測/優化。本研究將透過萃取並比較實驗室中，六片具有不同磊晶結構設計的 IMEC wafer 的 2DEG 特性，並反向推導出哪種磊晶設計有助於提高電子遷移率及增強 2DEG 濃度，為將來 AlGaIn/GaN HEMT 設計與優化提供些許方向。

2-1. 理解 AlGaIn/GaN 異質介面處 2DEG 的機制

要探討 AlGaIn/GaN HEMT 中 2DEG 的特性，就必須先理解 AlGaIn/GaN HEMT 產生 2DEG 的原理與機制，在此之前也要先簡要的介紹其結構。一個基本的 AlGaIn/GaN HEMT 其結構由下而上可分為 Silicon substrate (基板), GaN channel (通道層), AlGaIn barrier (障壁層), P-GaN 以及 Gate contact。

簡要介紹主要結構的用處：

- 基板用以提供生長基底、機械支撐，也決定了晶圓譬如熱導率的物理特性。
- 通道層用以乘載 2DEG，其磊晶品質 (是否有晶格缺陷)、通道厚度、摻雜狀況、熱管理都會影響元件的性能。
- 障壁層用來產生高濃度電子，並使高濃度電子被侷限於介面處，形成高濃度、高電子遷移率的 2DEG。

如同上述，2DEG 的形成原因在於通道層與障壁層的相互作用，其原理主要可以歸納為兩點，分別是自發極化 (Spontaneous Polarization) 與壓電極化 (Piezoelectric Polarization)。

自發極化的原動力是 AlGaIn 跟 GaN 中都存在著名為纖鋅礦 (Wurtzite) 的非對稱六方晶體結構，即便在無外力的情況下，這種非對稱性也將使晶體內的正負電荷中心沿極軸 (C 軸) 分離。而壓電極化的原動力是 AlGaIn 與 GaN 之間的晶格失配 (lattice mismatch)，當 AlGaIn 生長於在 GaN 上時，由於 AlGaIn 晶體的晶格常數較 GaN 小，其原子鍵會被迫往 GaN 的方向拉伸，產生額外的極化電荷。因為自發極化與壓電極化的方向一致，兩種極化效應會相互疊加，使極化電荷密度大幅提高。

這些極化電荷會在 AlGaIn/GaN 異質界面處形成強烈的極化電場，使 GaN 側的導帶向下

彎曲，產生一個量子井結構，能夠吸引電子並將其侷限於 GaN 端的界面處，形成高濃度的二維電子氣 (2DEG)。

2DEG 的濃度可說由自發極化與壓電極化所決定，但影響其電子遷移率卻更為複雜。影響電子遷移率的機制包含但不限於通道品質、電子是否滲入 AlGaIn barrier、各種不同的散射原因等。而不同的磊晶設計可以對元件的極化作用、散射作用以及滲透作用產生增益與補償，因此設計者可以透過客製磊晶設計來優化 HEMT 的 2DEG 特性。

3. 研究結果

由於透露晶圓的成分組成與結構可能侵犯智慧財產權，所以將不會在此公布，但經過量測數據的比對我們可以得出一些結論：

- 在無其他變量的情況下，增厚 AlGaIn barrier 可以提高 2DEG 濃度，但是 mobility 會降低。
- 在無其他變量的情況下，增加 AlGaIn barrier 的鋁濃度可以提高 2DEG 濃度，mobility 會降低，但是相較增厚 barrier 來說犧牲的性能較少。
- 在 AlGaIn/GaN 異質界面中間添加 AlN bottom spacer 可以增加 2DEG 濃度並補償 mobility 的下降。
- Bottom spacer 的鋁濃度會影響前項提到的濃度增益與 mobility 補償性能。

回顧上一章節中關於 2DEG 形成機制，自發極化來自於晶體的不對稱性，而壓電極化來自於晶格失配。

		AlN	GaN
Lattice constant (Å)	<i>a</i>	3.111	3.189
	<i>c</i>	4.980	5.182
Thermal expansion coefficient ($\times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$)	<i>a</i>	5.3	5.59
	<i>c</i>	4.2	7.75

Fig. 1 AlN 與 GaN 的晶格常數與熱膨脹係數 [1]

透過 Fig. 1 我們可以看到不論是晶格常數或是熱膨脹係數，AlN 都比 GaN 要小。已知 $Al_mGa_{1-m}N$ 的晶格常數可以透過 Vegard's Law 計算：

$$C(x) = C_0^{GaN}(1-x) + C_0^{AlN}(x)$$

不難發現， $Al_mGa_{1-m}N$ 的晶格常數會隨著鋁濃度的提升而逐漸降低，並隨著鋁濃度占比的提高越發接近 AlN 的晶格常數。而 AlGaN/GaN 晶格失配的程度取決於兩者的晶格差異與厚度[2]。而當晶格失配程度增加，AlGaN 所受到來自 GaN 拉伸張力（tensile strain）也會增加，壓電極化增強，在介面處形成更強的極化電場。

提升 barrier 厚度也會提高極化電場，因為 GaN 的厚度遠大於 AlGaN barrier，整個上層結構都需要對齊下層晶格、受下層結構拉伸的體積增加，使壓電極化增強，故使 2DEG 濃度上升，但提高厚度也會因為 AlGaN 能差分佈距離增加導致對於 2DEG 的侷限性減弱。當厚度過厚或晶格差過大時，過於強大的應力可能會透過位錯（dislocation）來釋放，造成缺陷，反而使 2DEG 性能下降[3]。

Table I. Band gap, polarization, and corresponding polarization bound charge for GaN, AlN, and $Al_xGa_{(1-x)}N$

	GaN	AlN	$Al_xGa_{(1-x)}N$
Band gap (eV)	3.4	6.2	$3.4(1-x) + 6.2x$
Spontaneous polarization (C/m ²)	-0.029	-0.081	$-0.029(1-x) - 0.081x$
Polarization bound charge (10 ¹³ charges/cm ²)	1.81	5.06	$1.81(1-x) + 5.06x$

Fig. 2 GaN, AlN 與 $Al_mGa_{1-m}N$ 的能隙、自發極化與極化束縛電荷[4]

鋁濃度不只會影響晶格常數，透過 Fig. 2 可以看到，隨著 $Al_mGa_{1-m}N$ 中鋁濃度的提升，自發極化的強度也在逐漸提高。這代表鋁濃度的提高不只能夠增益壓電極化，也可以增益自發極化，由於提高濃度變相的提高了整層 barrier 的自發極化與壓電極化，這也可以說明為什麼提高 barrier 鋁濃度對 2DEG 濃度提高的效果較 barrier 厚度來的大。

至於 bottom spacer 對於 2DEG 的影響可以分為「有無」與「成分組成」兩者來討論。從測量結果我們可以發現 AlN bottom spacer 的存在不只能夠提高 n_s 更可以提高 mobility，前者可以通過前述的壓電極化與自發極化理論來解析：AlN 本身提供的自發極化還有因其顯著更低的晶格常數與 GaN layer 之間的晶格應力產生的壓電極化效應使介面處產生了更強的極化電場，使得導帶進一步向下彎曲，形成更深的量子井，吸引了更多電子侷限在 GaN 通道，從而提高 2DEG 的濃度。

至於 mobility 的提升，則需要引入其他的原因來解釋。從 Fig. 2 我們可以看到 $Al_mGa_{1-m}N$ 的能隙會隨著鋁濃度的提升而升高，最後會達到 AlN 的 6.2eV。這也代表 $Al_mGa_{1-m}N$ 與 GaN 之間的障壁會隨著鋁濃度的升高而提升，降低了電子因穿隧作用或是熱激發從通道滲入 barrier 的可能性。

一般而言，2DEG 的電子主要受三種散射影響：光學聲子散射 (optical phonon scattering)、界面粗糙散射 (interface roughness scattering) 以及合金散射 (alloy

scattering)。其中光學聲子散射會隨溫度升高而增強，屬於不可避免的散射機制，因此在實務上，主要仍著重於減少界面粗糙散射與合金散射來優化元件性能。

界面粗糙散射則與界面品質相關，而合金散射則取決於 barrier 的組成及電子在 AlGaN barrier 中的滲透程度[5]。當在 AlGaN 與 GaN 之間加入一層 AlN bottom spacer 時，因為其更寬的能隙以及更強的極化電場增加了能障的高度，2DEG 的滲透被有效抑制。即使 2DEG 滲入 bottom spacer，也會因為 AlN 本身是二元化合物 (binary compound)，其晶格中不存在隨機性，可以無視合金散射。此外由於極化電場升高，使 2DEG 進一步被推向 GaN 通道內部，遠離了 AlN/GaN 界面，降低了界面粗糙散射的影響。故綜合而言，設計者可以透過增加 AlN bottom spacer 同時減弱合金散射與界面粗糙散射，對 mobility 進行補償。

Bottom spacer 材質與 2DEG 的關係也可以透過該理論來解釋。量測數據中 X12 的 2DEG 濃度與 mobility 皆略輸於 X17 晶圓，可以透過 X12 bottom spacer 的鋁濃度只有 30%，對於介面粗糙散射與合金散射的優化不如 AlN 來的大，同時因為鋁濃度的落差，其提供的 2DEG 濃度也不如 AlN bottom spacer 來的大。

4. 結論

本研究對六片具有不同磊晶設計的晶圓進行了 2DEG density 與 mobility 的量測與分析，透過綜合量測結果與理論分析，可得到以下結論：

- 增厚 AlGaN barrier 將使界面極化電場強度增加，使 2DEG 濃度上升。但較厚的 barrier 也因為電場減弱、對電子的侷限力變差、使電子更容易滲入 AlGaN 層，導致界面粗糙散射與合金散射加劇，使 mobility 下降。
- 提升 AlGaN barrier 的鋁濃度同樣可以增加 2DEG 濃度。較高的鋁濃度可同時增益自發極化與壓電極化。相較於單純增厚 barrier，提高鋁濃度在提升 2DEG 濃度的同時對 mobility 的犧牲較小。
- 在 AlGaN/GaN 界面中加入 AlN bottom spacer 可同時提升 2DEG 濃度與電子遷移率。AlN 本身的強自發極化還有與 GaN 高晶格失配率可以大幅強化界面極化電場，導致導帶形成更深的量子井，使 2DEG 更有效侷限於 GaN 通道中，因而提升 2DEG 濃度；另一方面由於 AlN 是二元化合物，故其晶格沒有隨機性，電子在滲入後不會產生合金散射；同時其更大的能隙可以形成更高的能障，可有效的抑制電子穿隧至 AlGaN barrier，大幅減少合金散、同時控制電子靠近通道內部，降低界面粗糙散射、大幅補償 mobility。

綜合來說，AlGaN barrier 的參數與 bottom spacer 對 2DEG 特性具有關鍵影響；提升 barrier 鋁濃度比厚度更能有效提升 2DEG 濃度而兼顧 mobility；加入 AlN bottom spacer

則可同時增益極化效應並降低散射、補償提升 barrier 厚度與鋁濃度帶來的 mobility 下降，是改善 AlGaIn/GaN HEMT 材料品質的有效策略。

研究心得

透過本次的專題實作，我學習到許多課堂上並未提及、需要自行深入查找的知識，讓我久違的體會到了高中進行小論文獨立研究時的感覺。由於 HEMT 的元件結構與大二上時在電子學課程中接觸的 MOSFET 截然不同，導致我剛開始進行背景研究時花了相當多時間閱讀文獻與整理相關資料，過程中也經歷不少困難。

我最初的研究方向是希望能透過理論模型，透過 C-V 量測出的結果直接在 Excel 上估算 2DEG 濃度。然而由於對相關物理概念的掌握仍不夠完整，加上模型的假設與現實差異較大，最終推算出的數值與萃取出來的數值相差過大，且無法找到合理的修正方式。在多次嘗試無果之後，我決定調整研究策略，改以實際量測結果為主，透過比較不同磊晶設計下的 2DEG 濃度與 mobility，來反向分析設計參數與元件性能之間的關聯性。

在本學期中，在學長的指導下，我學會了許多實作技巧，例如實際操作設備進行 C-V 與 TLM 量測、還有 KLayout 等各種軟體的基本操作等。雖然因為本學期課程較繁重，無法每次都與其他專題生一起參與教授的會議，但透過與學長額外安排時間討論，我仍獲得了相當充實的研究經驗。

整體而言，本次實作專題讓我對 AlGaIn/GaN HEMT 的背景、磊晶結構設計及實際量測技術都有了更深入的了解，也培養了面對問題時調整策略、重新規劃研究方向的能力。未來若有機會，我希望能在此基礎上進一步探索更多與高功率元件相關的主題。

附錄. 參考文獻

- [1] Chen, Tei-Chen & Lee, Yuh-Ju & Wu, Hsiang-Chi & Ho, Chang-Hsien. (2008). Influences of thermal annealing and indium content on mechanical stresses and optoelectronic characteristics of light emitter diodes. *Journal of the Chinese Institute of Engineers*. 31. 291-299. 10.1080/02533839.2008.9671382.
- [2] S. Smirnov, "Physical Modeling of Electron Transport in Strained Silicon and Silicon-Germanium," Ph.D. dissertation, Technische Universität Wien, Vienna, Austria, Dec. 2003.
- [3] H. Liu, H. Huang, K. Wang, Z. Xie, and H. Wang, "Impact of composition and thickness of step-graded AlGaIn barrier in AlGaIn/GaN heterostructures," *Materials Science in Semiconductor Processing*, vol. 178, p. 108460, 2024, doi: 10.1016/j.mssp.2024.108460.
- [4] B. S. Eller, J. Yang, and R. J. Nemanich, "Polarization Effects of GaN and AlGaIn: Polarization

Bound Charge, Band Bending, and Electronic Surface States," *Journal of Electronic Materials*, vol. 43, no. 12, pp. 4560–4566, 2014, doi: 10.1007/s11664-014-3383-z.

[5] Wosko, Mateusz & Paszkiewicz, B. & Paszkiewicz, Regina & Tlaczala, Marek. (2013). Influence of AlN spacer on the properties of AlGaN/AlN/GaN heterostructures. *Optica Applicata*. 43. 61-66. 10.5277/oa130108.

[6] P. Huang, X. Chen, H. Wang, S. Hsu, and R. Wong, "Comprehensive study of Human-Body-Model electrostatic discharge on p-GaN gate power HEMT with AlGaN barrier spacers," *Intl. Symp. Power Semiconductor Devices and ICs (ISPSD)*, Bremen, pp. 538-541, June 2024