物理学报 Acta Physica Sinica



直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 本征载流子浓度研究

白敏 宣荣喜 宋建军 张鹤鸣 胡辉勇 舒斌

Study on intrinsic carrier concentration of direct bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$

Bai Min Xuan Rong-Xi Song Jian-Jun Zhang He-Ming Hu Hui-Yong Shu Bin

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 63, 238502 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.238502 在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.238502 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/volumn/home.shtml

您可能感兴趣的其他文章 Articles you may be interested in

应变(001)p型金属氧化物半导体反型层空穴量子化与电导率有效质量 刘伟峰, 宋建军

2014, 63(23): 238501. 全文: PDF (905KB)

对称三材料双栅应变硅金属氧化物半导体场效应晶体管二维解析模型 辛艳辉, 刘红侠, 王树龙, 范小娇 2014, 63(14): 148501. 全文: PDF (1083KB)

90 nm 互补金属氧化物半导体静态随机存储器局部单粒子闩锁传播效应诱发多位翻转的机理 陈睿, 余永涛, 上官士鹏, 封国强, 韩建伟 2014, 63(12): 128501. 全文: PDF (8357KB)

SOI SiGe HBT 结构设计及频率特性研究 宋建军,杨超,朱贺,张鹤鸣,宣荣喜,胡辉勇,舒斌 2014, 63(11): 118501. 全文: PDF (2071KB)

累积剂量影响静态随机存储器单粒子效应敏感性研究 肖尧,郭红霞,张凤祁,赵雯,王燕萍,丁李利,范雪,罗尹虹,张科营 2014, 63(1): 018501. 全文: PDF (515KB)

直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 本征载流子浓度研究^{*}

白敏 宣荣喜 宋建军† 张鹤鸣 胡辉勇 舒斌

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

(2014年6月25日收到;2014年7月22日收到修改稿)

通过合金化改性技术, Ge可由间接带隙半导体转变为直接带隙半导体. 改性后的 Ge 半导体可同时应用 于光子器件和电子器件, 极具发展潜力. 基于直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 半导体合金 8 带 Kronig-Penny 模型, 重点 研究了其导带有效状态密度、价带有效状态密度及本征载流子浓度, 旨在为直接带隙改性 Ge 半导体物理的 理解及相关器件的研究设计提供有价值的参考. 研究结果表明: 直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带有效状态密度 随着 Sn 组分 x 的增加而明显减小, 价带有效状态密度几乎不随 Sn 组分变化. 与体 Ge 半导体相比, 直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带有效状态密度、价带有效状态密度分别低两个和一个数量级; 直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金本 征载流子浓度随着 Sn 组分的增加而增加, 比体 Ge 半导体高一个数量级以上.

关键词: Ge_{1-x}Sn_x, 直接带隙, 本征载流子浓度 PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv

1引言

Ge为间接带隙半导体,改性可致其转变为准 直接带隙,甚至是直接带隙半导体.目前,国内 外直接带隙Ge改性实现方法主要有以下两种:第 一种是施加高强度张应力,使Ge转变为直接带隙 半导体;第二种是采用合金化的手段(如典型的 Ge_{1-x}Sn_x合金),获得直接带隙改性Ge半导体.改 性后的Ge半导体可应用于光子器件,其转换效率 高,直接带隙发光效率与III-V族半导体相当^[1-4]. 同时,直接带隙情况下Ge载流子迁移率增强,该改 性半导体还可应用于电子器件,具有工作速度高、频率特性好的优点.因此,对直接带隙改性Ge半导 体的相关研究已成为当前国内外研究的热点和重 点之一^[5-8].

本征载流子浓度是半导体材料的重要物理参数,也是决定半导体器件电学性能的重要参量^[9]. 目前尚未见有关直接带隙改性Ge半导体本征载流 子浓度的相关报道.本文以直接带隙Ge_{1-x}Sn_x合 金半导体为例,首先基于直接带隙Ge_{1-x}Sn_x半导

DOI: 10.7498/aps.63.238502

体合金8带kp模型,获得计算本征载流子浓度的 各能带参量.在此基础上,进一步给出直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x合金电子、空穴态密度有效质量模型,并 最终仿真获得直接带隙Ge_{1-x}Sn_x合金导带、价带 有效状态密度,以及本征载流子浓度模型.本文直 接带隙Ge_{1-x}Sn_x合金半导体本征载流子浓度模型 推导细致,所得模型数据量化,可为直接带隙改性 Ge半导体物理的理解及相关器件的研究设计提供 有价值的参考.

2 能带结构模型

建立直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金半导体本征载流 子浓度 (n_i) 模型, 需要首先研究其能带结构. 基于 直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金半导体能带结构, 给出建 立本征载流子浓度模型所需的能带参量, 如直接 带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金禁带宽度 E_g , 电子/空穴有效 质量.

鉴于 kp 能带理论的特点, 尤其是所建模型解 析的优点, 本文基于 kp 理论框架建立了直接带隙

* 教育部博士点基金(批准号: JY0300122503)和陕西省自然科学基础研究计划(批准号: 2014JQ8329)资助的课题.

© 2014 中国物理学会 Chinese Physical Society

[†]通讯作者. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn

 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金能带结构模型.建模之前,需要首先 说明的是,通常 IV 族半导体 (如 Si, Ge) kp 能带模 型包括导带和价带两部分,且它们可分别建模给出 相应的解析模型^[10,11].而对于直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金而言,由于 Sn 掺杂对 Ge 能带结构的调制作用, 导带和价带之间存在明显的"耦合作用"^[12,13].在 建模过程中,必须对其予以考虑.也就是说,直接 带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金能带 kp 本征值模型需同时包 括导带和价带两部分,本征值矩阵维数至少为8,具 体表达式如下:

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} C & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}P_{-}^{*} & -\sqrt{\frac{2}{3}}P_{Z} & -\frac{1}{\sqrt{6}}P_{-}^{*} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}P_{Z} & -\frac{1}{\sqrt{3}}P_{+}^{*} \\ 0 & C & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}}P_{-}^{*} & -\sqrt{\frac{2}{3}}P_{Z} & -\frac{1}{\sqrt{2}}P_{+}^{*} & -\frac{1}{\sqrt{3}}P_{-}^{*} & \frac{1}{\sqrt{3}}P_{Z} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}P_{-} & 0 & HH & S & -R & 0 & \frac{S}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}R \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}P_{Z} & \frac{1}{\sqrt{6}}P_{-} & S^{*} & LH & 0 & -R & -D & -\sqrt{\frac{2}{3}}S \\ -\frac{1}{\sqrt{6}}P_{-} & -\sqrt{\frac{2}{3}}P_{Z} & -R^{*} & 0 & LH & -S & -\sqrt{\frac{2}{3}}S^{*} & D \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}P_{+} & 0 & -R^{*} & -S^{*} & HH & \sqrt{2}R^{*} & \frac{S^{*}}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}P_{Z} & -\frac{1}{\sqrt{3}}P_{-} & \frac{S^{*}}{\sqrt{2}} & -D & -\sqrt{\frac{2}{3}}S & \sqrt{2}R & V & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}P_{-} & \frac{1}{\sqrt{3}}P_{Z} & -\sqrt{2}R^{*} & -\sqrt{\frac{2}{3}}S^{*} & D & \frac{S}{\sqrt{2}} & 0 & V \end{bmatrix},$$
(1)

式中,

$$C = E_{\rm g}^{\Gamma} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{m_{\rm c}} - \frac{E_p}{3} \left(\frac{2}{E_{\rm g}^{\Gamma}} + \frac{1}{E_{\rm g}^{\Gamma} + \Delta} \right) \right] \times (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \tag{2}$$

$$HH = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2], \qquad (3)$$

$$LH = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2], \qquad (4)$$

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \Delta,$$
 (5)

$$S = -\frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3}\gamma_3(-k_x + ik_y)k_z,$$
 (6)

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2\gamma_3 ik_x k_y], \quad (7)$$

$$D = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{2}\gamma_2(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2),$$
(8)

$$P_{\pm} = P_0(k_x \pm ik_y), \quad P_z = P_0k_z, \tag{9}$$

$$\gamma_1 = \gamma_1^{\mathrm{L}} - \frac{2m_0p_0}{3\hbar^2 E_{\mathrm{g}}},$$

$$\gamma_{2} = \gamma_{2}^{L} - \frac{m_{0}p_{0}^{2}}{3\hbar^{2}E_{g}},$$

$$\gamma_{3} = \gamma_{3}^{L} - \frac{m_{0}p_{0}^{2}}{3\hbar^{2}E_{g}}.$$
(10)

此外, (10) 式中 Luttinger 参数 γ_1^L , γ_2^L , γ_3^L 对应6带 kp模型参数^[14]; E_g^{Γ} 为Ge半导体 Γ 点导带底与价 带顶能级差^[14]; Δ 为Ge半导体旋轨分裂能^[14]; m_c 为Ge半导体导带 Γ 点电子有效质量^[14]; k_x , k_y , k_z 为倒易空间波矢量, 分别对应[001], [010], [100] 晶向.

基于 (1) 式, 可获得直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金禁 带宽度 E_g 、电子/空穴有效质量随 Sn 组分 x 的变化 关系 (见图 1 — 图 3). 同时, 为方便后续讨论, 给出 了直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金的 E_g 、电子态密度有效 质量 $m_{e,DOS}$ 、轻空穴有效质量 $m_{LH,a}$ 、重空穴有效 质量 $m_{HH,a}$ 的解析表达式:

$$\begin{cases} E_{\rm g} = 0.763 - 2.61x, \\ m_{\rm e,DOS} = 0.041 - 0.1167x, \\ m_{\rm LH,a} = 0.0496 - 0.157x, \\ m_{\rm HH,a} = 0.03 \exp(-x/0.11) + 0.3. \end{cases}$$
(11)

238502 - 2



图1 直接带隙 Ge1-xSnx 禁带宽度与 Sn 组分的关系



图 2 直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 电子态密度有效质量与 Sn 组分的关系



图 3 直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 空穴平均有效质量与 Sn 组分的关系

由图1和图2可见,直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金 禁带宽度、导带电子有效质量(由于导带 Γ 点等 能面为球形,该有效质量亦是电子态密度有效 质量 $m_{e,DOS}$)随Sn组分的增加而线性减小.由 图3可见,直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金重空穴有效质 量 $m_{HH,a}$ 几乎不随Sn组分变化,轻空穴有效质量 $m_{LH,a}$ 随Sn组分的增加而略微减小. 基于图3所示的直接带隙Ge_{1-x}Sn_x合金轻、 重空穴有效质量数据,采用下式

$$m_{\rm H,DOS} = \left[(m_{\rm HH,a})^{3/2} + (m_{\rm LH,a})^{3/2} \right]^{2/3}$$
 (12)

可进一步给出直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金空穴态密度 有效质量随 Sn 组分的变化关系,结果如图 4 所示. 由图 4 可见,直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金空穴态密度 有效质量随 Sn 组分的增加而减小.



图 4 直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 空穴态密度有效质量与 Sn 组 分的关系

3 本征载流子浓度模型

在第二节直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金能带结构建 模的基础上,基于直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金导带底 电子和价带顶空穴态密度有效质量模型,利用 (11), (12) 式建立直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金导带、价带有 效状态密度模型:

$$\begin{cases} N_{\rm C} = 2 \times (2\pi m_{\rm e,DOS} k_{\rm B} T/h^2)^{3/2}, \\ N_{\rm V} = 2 \times (2\pi m_{\rm H,DOS} k_{\rm B} T/h^2)^{3/2}. \end{cases}$$
(13)

最后,将(11)和(13)式所得结果代入(14)式, 本文建立了直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金本征载流子浓 度模型:

$$n_{\rm i} = (N_{\rm C} N_{\rm V})^{1/2} \exp(-E_{\rm g}/2k_{\rm B}T),$$
 (14)

式中 $k_{\rm B}$ 为Boltzman 常量 (1.38×10⁻²³ J·K⁻¹).

图 5 和图 6 分别给出了 218, 300, 393 K时直接 带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带、价带有效状态密度与 Sn 组分的函数关系.由图 5 可见:直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带有效状态密度随着 Sn 组分 x 的增加而明 显减小;温度 T 与直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带有 效状态密度是正比关系,随着温度的升高,直接 带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带有效状态密度相应增加. 此外,与体 Ge 半导体相比,直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合 金导带有效状态密度低两个数量级.而由图6可见,当温度一定时,直接带隙Ge_{1-x}Sn_x合金价带 有效状态密度几乎不随Sn组分变化.直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x合金价带有效状态密度随温度T的变化 情况与导带有效状态密度的变化规律一致.与体 Ge半导体相比,直接带隙Ge_{1-x}Sn_x合金价带有效 状态密度低一个数量级.



图 5 直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 导带有效状态密度与 Sn 组分的关系



图 6 直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 价带有效状态密度与 Sn 组分的关系

基于已建立的直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带 有效状态密度 $N_{\rm C}$ 、价带有效状态密度 $N_{\rm V}$ 及禁带 宽度模型,下面分析直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金本征 载流子浓度模型.图7为室温300 K下直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金本征载流子浓度与Sn组分 x 的关 系.由图7可见,虽然直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导 带、价带有效状态密度随着 Sn组分 x 的增加而减 小,但其本征载流子浓度却随着 Sn组分 x 的增加 而增加.这主要是因为本征载流子浓度与禁带宽度 $E_{\rm g}$ 成负指数关系,禁带宽度随 Sn组分 x 的增加而减 小,导致本征载流子浓度随着 Sn组分 x 的增加而减 比,直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金导带、价带有效状态密度分别低两个、一个数量级,而直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金本征载流子浓度相对于体 Ge 半导体却高一个数量级以上,该物理现象亦由直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 禁带宽度随 Sn 组分的增加而减小引起.

此外,为了验证本文模型的准确性,本文还分 析了Sn组分为0时即体Ge半导体的价带有效状态 密度模型,所得结果与文献[15]结果一致,据此可 以间接说明本文直接带隙Ge_{1-x}Sn_x合金本征载流 子浓度模型的正确性.



图 7 室温 300 K下直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 本征载流子浓 度与 Sn 组分的关系

4 结 论

Ge为间接带隙半导体,改性可致其转变为直 接带隙半导体,应用于光子器件,转换效率高,应用 于电子器件,工作速度高、频率特性好,对该半导体 的研究是当前国内外研究的热点和重点之一.本征 载流子浓度是半导体材料的重要物理参数,也是决 定半导体器件电学性能的重要参量.本文以直接带 隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金半导体为例,首先基于直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 半导体合金8带 kp 模型,获得计算本征 载流子浓度的各能带参量.在此基础上,进一步给 出了直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金电子、空穴态密度有 效质量模型,并最终仿真获得直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金导带、价带有效状态密度,以及本征载流子浓 度模型. 研究结果表明: 直接带隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金 导带有效状态密度随着Sn组分x的增加而明显减 小,价带有效状态密度几乎不随 Sn 组分变化. 与体 Ge半导体相比, 直接带隙 Ge_{1-x}Sn_x 合金导带、价 带有效状态密度分别低两个和一个数量级;直接带 隙 $Ge_{1-x}Sn_x$ 合金本征载流子浓度随着Sn组分的 增加而增加,比体Ge半导体高一个数量级以上.本 文直接带隙Ge1-xSnx 合金半导体本征载流子浓度 模型推导细致,所得模型数据量化,可为直接带隙 改性Ge半导体物理的理解及相关器件的研究设计 提供有价值的参考.

参考文献

- Michael O, Konrad K, Tzanimir A, Gregor M 2014 IEEE Photon. Technol. Lett. 26 187
- [2] Zhang D L, Xue C, Cheng B, Su S J, Liu Z, Zhang X, Zhang G Z, Li C B, Wang Q M 2013 Appl. Phys. Lett. 102 141111
- [3] Tseng H H, Li H, Mashanov V, Yang Y J, Cheng H H, Chang G E, Soref R A, Sun G G 2013 Appl. Phys. Lett. 103 231907
- [4] Soref R A, Sun G, Cheng H H 2012 J. Appl. Phys. 111 123113
- [5] Tonkikh A A, Eisenschmidt C, Talalaev V G, Zakharov N D, Schilling J, Schmidt G, Werner P 2013 Appl. Phys. Lett. 103 032106
- [6] Gallagher J D, Xu C, Jiang L Y, Kouvetakis J, Menéndez J 2013 Appl. Phys. Lett. 103 202104

- [7] Yang B, Cai M 2011 Sci. China: Inform. Sci. 54 946
- [8] Michael O, Konrad K, Kaiheng Y, Stefan B, Kai U 2014 Opt. Express 22 839
- [9] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X
 2010 Acta Phys. Sin. 59 2064 (in Chinese) [宋建军, 张 鹤鸣, 胡辉勇, 戴显英, 宣荣喜 2010 物理学报 59 2064]
- [10] Song J J, Zhang H M, Dai X Y, Hu H Y, Xuan R X
 2008 Acta Phys. Sin. 57 7228 (in Chinese) [宋建军, 张 鹤鸣, 戴显英, 胡辉勇, 宣荣喜 2008 物理学报 57 7228]
- [11] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2007 Chin. Phys. 16 3827
- [12] Kao K H, Verhulst A S, Put M V, Vandenberghe W G, Soree B, Magnus W, Meyer K D 2014 J. Appl. Phys. 115 044505
- [13] Kurdi M E, Fishman G, Sauvage S, Boucaud P 2010 J. Appl. Phys. 107 013710
- [14] Low K L, Yang Y, Han G, Fan W J, Yeo Y C 2012 J. Appl. Phys. 112 103715
- [15] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 1994 Semiconductor Physics (Beijing: Defense Industry Press) p367 (in Chinese) [刘 恩科, 朱秉升, 罗晋生 1994 半导体物理学(北京: 国防工业 出版社) 第 367 页]

Study on intrinsic carrier concentration of direct bandgap $\operatorname{Ge}_{1-x}\operatorname{Sn}_x^*$

Bai Min Xuan Rong-Xi Song Jian-Jun[†] Zhang He-Ming Hu Hui-Yong Shu Bin

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

(Received 25 June 2014; revised manuscript received 22 July 2014)

Abstract

Indirect bandgap Ge can be turned to a direct bandgap semiconductor by the alloy-modified technique, which can be applied to advanced photonic devices and electronic devices. Based on 8 bands Kronig-Penny Hamilton, this paper focuses on the physical parameters of direct bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, such as conduction band effective density of states, valence band effective density of states and the intrinsic carrier concentration, and aims to provide valuable references for understanding the direct bandgap modified Ge materials and device physics as well as their applications. Results show that: conduction band effective density of states in direct bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloy decreases obviously with increasing Sn fraction, while its valence band effective density of states almost does not change with increasing Sn fraction. Compared with bulk Ge, the conduction band effective density of states and valence band effective density of states in direct bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloy are lower by two and one orders of magnitude respectively; the intrinsic carrier concentration in direct bandgap $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloy increases with increasing Sn fraction, and its value is an order of magnitude higher than that of bulk Ge.

Keywords: $Ge_{1-x}Sn_x$, direct bandgap, intrinsic carrier concentration PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv DOI: 10.7498/aps.63.238502

^{*} Project supported by the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. JY0300122503) and the Natural Science Basic Research Plan in Shaanxi Province of China (Grant No. 2014JQ8329).

[†] Corresponding author. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn