

单频导纳谱法测量锗硅 量子阱的能带偏移*

陆 昉 蒋家禹 龚大为¹⁾ 孙恒慧

复旦大学物理系, 上海 200433

(1993年4月13日收到)

提出了用单频导纳谱法测量锗硅单量子阱的能带偏移, 与常规的多频导纳谱相比, 它只需测一个频率的导纳谱就能得到更精确的实验结果。用该方法对 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.33}\text{Si}_{0.67}/\text{Si}$ 单量子阱进行测试, 得到激活能为 $E_a = 0.20\text{eV}$ 。为了计算出能带偏移值, 必须能准确确定具有单量子阱结构样品中的费密能级位置, 由于在单量子阱结构中费密能级的位置与阱材料、垒材料的掺杂浓度、阱的高度(即能带偏移)及温度等几个因素均有关。为此, 本文通过解泊松方程, 计算出结合本文样品参数的具体单量子阱能带图及费密能级位置。计算结果表明, 费密能级位于阱材料的禁带之内, $E_F - E_{v_1} = 0.04\text{eV}$ 。由于单量子阱两边的载流子向阱内转移, 使阱中平均载流子浓度 ($2 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$) 比掺杂浓度 ($1 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$) 要大一个数量级。并使界面附近阱和垒的能带发生弯曲, 其分别为 0.006 和 0.11eV , 由此计算出 $\text{Ge}_{0.33}\text{Si}_{0.67}/\text{Si}$ 的价带偏移为 0.16eV 。通过理论模拟计算的结果表明, 单频导纳谱的方法是切实可行的。

PACC: 7280; 7940; 6865

一、引言

在半导体异质结、量子阱以及超晶格材料中, 界面处的能带偏移是决定材料电学和光学性质的一个十分重要的参数。自 1980 年 Kroemer 等人^[1]首次用 $C-V$ 测试方法测得 $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$ 异质结的能带偏移值来, 已有不少人^[2-4]用这一方法成功地对晶格匹配的 III-V 族异质结的能带偏移进行测试, 但对于锗硅异质结材料, 用这一方法来测量能带偏移时却遇到了较大的困难。最近, Nauka 等人^[5]用导纳谱法对锗硅材料的单量子阱结构进行测试, 由测得的激活能及费密能级与阱材料价带顶间的相对位置的计算, 可得到能带偏移数值。由于未考虑载流子在异质界面处的转移, 费密能级的计算过于简单, 直接影响能带偏移的准确数值。另外, 目前采用的导纳谱技术, 都是通过测量一组不同的测试频率下的样品导纳随温度的变化曲线来求得激活能的。本文对这一方法加以改进, 提出了单频导纳谱法, 用该方法只须测试单个频率的导纳谱就可得到所需的激活能。对于费密能级的计算将考虑由于界面间载流子转移引起的界面电势变化, 并通过解泊松方程来得到。

* 上海市青年科技启明星计划资助项目。

1) 复旦大学应用表面物理国家重点实验室, 上海 200433

与前人的方法相比,所得的实验结果将更准确可靠。此外,还将用理论模拟方法给出的样品导纳及电容随温度的变化曲线与实验谱线进行比较,以验证实验结果的正确性。

二、测量原理

导纳谱方法中采用的单量子阱样品结构如图 1(a) 所示,样品的背面与金属形成欧姆接触,表面与金属形成肖特基势垒。整个样品的等效电路如图 1(b) 所示,其中 C_d 为肖特基势垒所形成的耗尽层电容, C_w 与 G_w 分别为未耗尽层的电容和电导,它们与量子阱的结构有关,其中电导 G_w 是由势阱中的载流子热发射而引起,显然它是温度的函数并可表示为^[5]

$$G_w = [q^2 A V_t (T) N_v (T) / 2kT] \exp(-E_s/kT) = \alpha kT \exp(-E_s/kT), \quad (1)$$

式中 A 为样品的面积, V_t 为载流子热运动速率, N_v 为阱材料的价带等效态密度, E_s 为激活能。

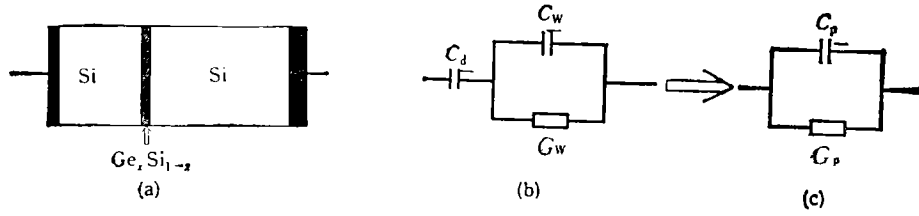


图 1 样品结构及等效电路图

在实验中,测量得到的是整个样品的并联电容 C_p 与电导 G_p , 如图 1(c) 所示,它们与 C_d , C_w , G_w 之间的关系为

$$C_p = [\omega^2 C_w C_d (C_w + C_d) + C_d G_w^2] / [G_w^2 + \omega^2 (C_w + C_d)^2], \quad (2)$$

$$G_p = \omega^2 C_d^2 G_w / [G_w^2 + \omega^2 (C_w + C_d)^2], \quad (3)$$

式中 $\omega = 2\pi f$, f 为测量中所用的交流小信号频率。由于 G_w 随温度的增加而指数增加, C_p 与 G_p 也都随温度的变化而变化。在高温端当 G_w 很大时, $G_{ph} \rightarrow 0$, $C_{ph} \rightarrow C_d$, 在低温端,当 $G_w \rightarrow 0$ 时, $C_{pl} = C_w C_d / (C_w + C_d)$, $G_{pl} \rightarrow 0$ 。因此在由低温向高温变化过程中,电导 G_p 出现峰值,电容 C_p 会出现一个跃变(参见图 6 所示),由 $dG_p/dG_w = 0$ 方程中,可解得出现极值的条件为

$$G_w(T_m) = \omega(C_w + C_d). \quad (4)$$

根据(1)式,(4)式又可写为

$$f = \alpha k T_m \exp(-E_s/kT_m) / 2\pi(C_w + C_d), \quad (5)$$

T_m 为峰值处对应的温度。常规的多频导纳谱法就是通过测量一组不同频率下的 G_p-T 曲线,即可得到一组 $f-T_m$ 的关系。作 $\ln(f/T_m) - 1/T_m$ 图,由斜率可得到 E_s 。

本文提出的单频导纳谱是从实验测得的某一固定频率下的 G_p-T 及 C_p-T 曲线上得到导纳谱峰值温度 T_m 处的 $G_p(T_m)$ 及所对应的 $C_p(T_m)$, 根据(2)~(4)式可求得 C_w , C_d 及 $G_w(T_m)$ 。由于在峰值温度 T_m 附近的样品总电导 G_p 的变化主要是由 G_w 随温度变化而引起,故可忽略温度 T 对 C_w , C_d 的影响,这可由下面得到证明。将求得的

C_w , C_d 值代入(3)式, 就可从实验曲线上峰值附近的一组 G_p 与 T 的数据中求得一组 G_w 与 T 的数值, 根据(1)式作 $\ln(G_w/T)-1/T$ 图就可求得激活能 E_a , 用这种方法只需记录一个频率的 C_p-T 及 G_p-T 实验曲线即可求得所需结果。

三、能带偏移的确定

从导纳谱测得的激活能 E_a 为势阱顶至费密能级的距离, 如图 2 中所示。

$$E_a = \Delta E_v + E_F - E_v(d). \quad (6)$$

要确定能带偏移值 ΔE_v , 还必须要确定异质界面处的费密能级 E_F 与阱材料价带顶之间的相对位置及距离。Nauka 等人

计算费密能级时, 用二维载流子浓度(假设为阱中掺杂浓度乘以阱宽)与二维态密度之比来获得。由于量子阱中的载流子浓度不仅与阱内的掺杂浓度有关, 更重要的还与形成量子阱后载流子的转移密切相关, 因此, 费密能级位置必须与阱材料、垒材料的掺杂浓度, 阱的高度即能带偏移的大小及温度这几个因素紧密相关。图 2 为典型的同型量子阱结构的能带图。

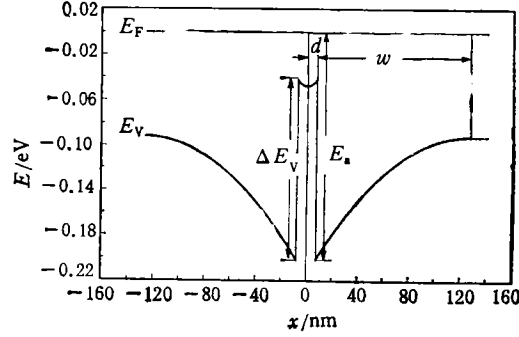


图 2 典型的单量子阱结构的能带图

其中费密能级可以位于阱材料的禁带之内或位于价带之内, 它与上述各个因素有关, 不能简单的确定。另外在均匀掺杂的量子阱结构中, 异质界面附近分别在垒内和阱内存在载流子的耗尽区和积累区。Nauka 等人由于未仔细考虑界面处能带的弯曲和载流子的转移, 对 E_F 的计算比较简单, 这会对能带偏移的计算带来一定误差。为此, 本文将通过解泊松方程来求出量子阱的能带图, 从而确定费密能级的位置。当不加外电压并且肖脱基势垒与量子阱势垒完全分开时, 图 2 的能带图具有对称性, 可以仅考虑 $x > 0$ 的区域, 并把它分成区域 1 和区域 2 两部分。

在 $d < x < w$ 区域 2 内, 由于空穴向阱内转移, 形成由电离受主所组成的空间电荷区, 可采用耗尽层近似, 因此在该区域中:

$$\text{电荷密度为 } \rho_2(x) = -eN_A, \quad (7)$$

$$\text{电场为 } E_2(x) = eN_A(w - x)/\epsilon_2, \quad (8)$$

$$\text{电势为 } V_2(x) = eN_A(w - x)^2/2\epsilon_2. \quad (9)$$

在 $0 < x < d$ 量子阱区域 1 内, 为空穴积累区, 由于阱内的载流子浓度可能会进入简并态, 杂质亦可能没有完全电离, 因此该区域的电荷密度应为阱中的空穴浓度 $P(x)$ 减去电离的受主浓度 $N_A^-(x)$ 。在区域 1 内电荷密度 $\rho_1(x)$, 电场 $E_1(x)$ 及电势 $V_1(x)$ 可分别表示为

$$\rho_1(x) = eP(x) - eN_A^-(x), \quad (10)$$

$$\begin{aligned} dE_1(x)/dx &= e/\epsilon_1 \cdot \{N_{v1}(2/\sqrt{\pi})F_{0.5}\{[E_{v1}(x) - E_F]/kT\} \\ &\quad - N_A/\{\exp[(E_{v1}(x) + \Delta E_A - E_F)/kT] + 1\}\}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$dV_1(x)/dx = -E_1(x), \quad (12)$$

其中 $Fer(y) = \int_0^\infty \{x^{1/2}/[1 + \exp(x-y)]\}dx$ 为费密积分, ΔE_A 为阱中受主杂质的电离能, 阱中价带顶的能带位置 $E_{v_1}(x)$ 可表示为

$$E_{v_1}(x) = E_{v_2}(\omega) - eV_1(x) + \Delta E_v. \quad (13)$$

如果阱中的费密能级在价带顶上, 即处于非简并状态, 同时杂质又基本上全部电离, 此时(11)式可简写为

$$dE_1(x)/dx = e/\epsilon_1 [P(x) - N_A] = e/\epsilon_1 \{N_{v_1} \exp[-(E_F - E_{v_1}(x))/kT] - N_A\}. \quad (14)$$

在界面处, 上述方程满足下列边界条件:

$$V_1(d) = V_2(d), \quad (15)$$

$$\epsilon_1 E_1(d) = \epsilon_2 E_2(d). \quad (16)$$

由对称性条件可知, 在阱的中心 $x=0$ 处, 电势达到最大值而电场为零, 即

$$E_1(0) = -dV_1/dx|_{x=0} = 0. \quad (17)$$

从实验中可以得到激活能 E_A 又可表示为

$$E_A = eV_2(d) + E_F - E_{v_2}(\omega) = eV_2(d) + kT \ln(N_{v_2}/N_A). \quad (18)$$

在单频导纳谱中, 已知 E_A 及其对应的温度 T_m 和掺杂浓度 N_A , 就可从(18)式中求出 $V_2(d)$, 并由(8),(9)式中得到 ω 及 $E_2(d)$, 根据(15),(16)式边界条件就可得到量子阱界面处的电场 $E_1(d)$ 及电势 $V_1(d)$. 有了这两个初值, 就可由(11),(12)式这一组微分方程进行数值求解, 从而得到 $x=0$ 至 $x=d$ 区域内的电场 $E_1(x)$ 及电势 $V_1(x)$ 的分布. 但在方程组(11),(12)还存在一变量 ΔE_v , 同时该方程还必须满足边界条件(17)式. 因此可先假设一初值 ΔE_v , 代入方程, 求出 $E_1(x)$ 及 $V_1(x)$, 验证 $E_1(0)$ 是否为零, 如果不是零, 则调整 ΔE_v 值再进行求解, 反复迭代直至满足(17)式边界条件为止. 这样不仅求出了量子阱的能带图, 同时也就得到了能带偏移值 ΔE_v .

值得说明的是, 在计算区域 1 的电场和电势时, 采用了体材料的计算公式, 即用三维模型近似代替二维模型, 在阱宽 $L_w > 150\text{Å}$ 时, 这一近似还是可取的^[6]. 本文还分别采用二维, 三维的不同模型来计算求得不同宽度方势阱中的载流子浓度. 二维的计算, 是采用方势阱的模型, 根据势垒的高度即 ΔE_v 求出势阱中的各个子能级, 然后由已知的费密能级位置求得各子能级上电子占有概率, 再乘以各自的态密度就可求得势阱中的载流子密度^[7]. 在本文的计算中, 对 $x=0.33$ 的量子阱, 取费密能级与阱底(即 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 价带顶)的距离为 $E_F - E_v = 0.04\text{eV}$, 势阱高度为 $\Delta E_v = 0.16\text{eV}$, $T = 167\text{K}$, 则用两种不同方法计算所得的载流子浓度随阱宽的变化如表 1 所示. 从表 1 中可以看出, 阱宽越大, 两者结果越接近, 当阱宽为 15nm 时, 两者的误差仅为 9%. 当然在实际模型中, 势阱也

表 1 用二维和三维模型计算所得到的载流子浓度 P_2, P_3 随阱宽的变化

阱宽 nm	5	10	15	20	25	30
$P_2/10^{17}$	1.13	1.67	1.85	1.94	1.99	2.03
$P_3/10^{17}$	2.04	2.04	2.04	2.04	2.04	2.04
相对误差/%	44	18	9.3	5.0	2.3	0.6

并不完全是方势阱,而是有一定的弯曲,但这个例子表明了,在(10)式中阱内的载流子浓度 $P(x)$ 的计算采用三维的计算公式还是完全可取的。

四、实验结果

单量子阱样品是用分子束外延 (MBE) 方法在 Si(100) 面上生长得到,衬底为低阻 p-Si, 电阻率为 $0.05\ \Omega\cdot\text{cm}$, 在衬底上依次生长 300 nm Si, 15 nm $\text{Ge}_{0.33}\text{Si}_{0.67}$ 以及 300 nm Si, 所生长的材料均为 P 型, 载流子浓度为 $1\times 10^{16}\text{cm}^{-3}$ 左右。在样品背后蒸铝合金形成欧姆接触, 正面蒸铝形成肖脱基势垒。样品的电容与电导是通过 HP 4275A LCR 仪器进行测量,该设备通过 IEEE-488 接口直接受计算机控制,测试结果直接进入计算机,由 FLUKE8840 A5 位半数字多用表测量反映样品温度的热电偶电压, 并也通过 IEEE-488 接口进入计算机。总之, 整个测试过程是在计算机控制下自动进行的。

图 3 是不加偏压时,在不同频率下,样品的电容 C_p 及电导 G_p 随温度的变化曲线,测试频率分别为 1000, 500, 300, 100kHz。常规的数据处理方法,是从不同频率的导纳谱峰值得到其所对应的温度 T_m , 如图 4(a) 所示, 图 4(b) 是 $\ln(f/T_m)-1/T_m$ 的关系图,用最小二乘法拟合,从直线斜率中得到激活能为 $E_a = 0.19\text{eV}$ 。从图 4(b) 中可以看出实验数据点的线性并不太好,相关系数 $r = 0.9986$ 。

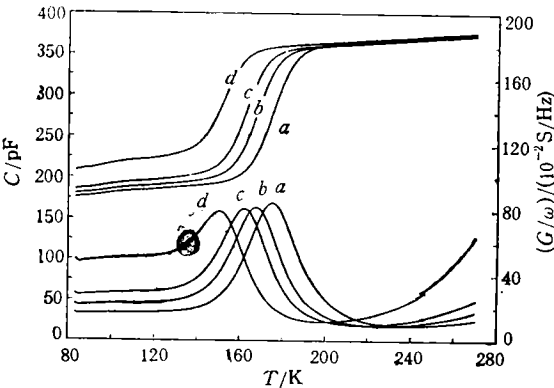


图 3 不同频率下样品的电容与电导随温度的变化曲线

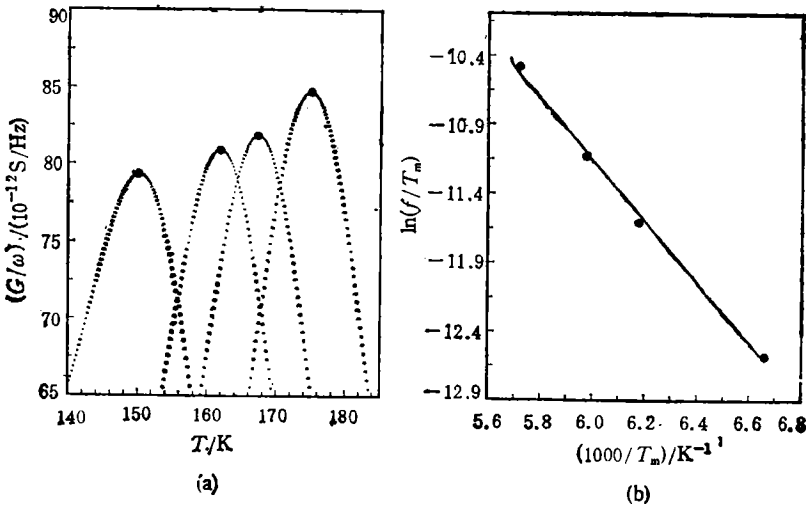


图 4 多频法 $\ln(f/T_m)-1/T_m$ 直线拟合图

用本文提出的单频导纳谱法对 E_a 的确定,是从某一测试频率,如 $f = 500 \text{ kHz}$ 的 C_p-T 及 G_p-T 曲线上确定极值温度 $T_m=167.3\text{k}$ 处的电导和电容值分别为 $G_p(T_m)=0.257\text{ms}$, $C_p(T_m) = 276\text{pF}$, 利用(2)–(4)式,就可求得相应的 $C_w = 424.5\text{pF}$, $G_w=2.46\text{ms}$, $C_d = 357.9\text{pF}$. 然后取 G_p-T 曲线峰值附近的实验数据点,如图 5(a) 所示的 15 个数据点,由(3)式可计算出相应的 G_w , 根据(1)式作 $\ln(G_w/T)-1/T$ 图,如图 5(b) 所示,从此直线斜率上求得激活能 $E_a = 0.198\text{eV}$, 从直线的截距求得 α 值. 与图 4 (b) 相比,数据点的线性关系则要好多,相关系数 $r = 0.9999$.

在多频法中,由 $\ln(f/T_m)-1/T_m$ 直线斜率上求得激活能 E_a , 这要求 E_a 与温度 T 无关. 但从(6)式中可知, E_a 与费密能级 E_F 有关, 而 E_F 随温度的变化则使 $\ln(f/T_m)-1/T_m$ 直线的线性变差. 计算的温度区间越大, E_F 变化就越大,直线的线性也就越差,如图 4(b) 所示.在单频法中,计算的温度区间很小, E_F 随温度的变化所引起的误差

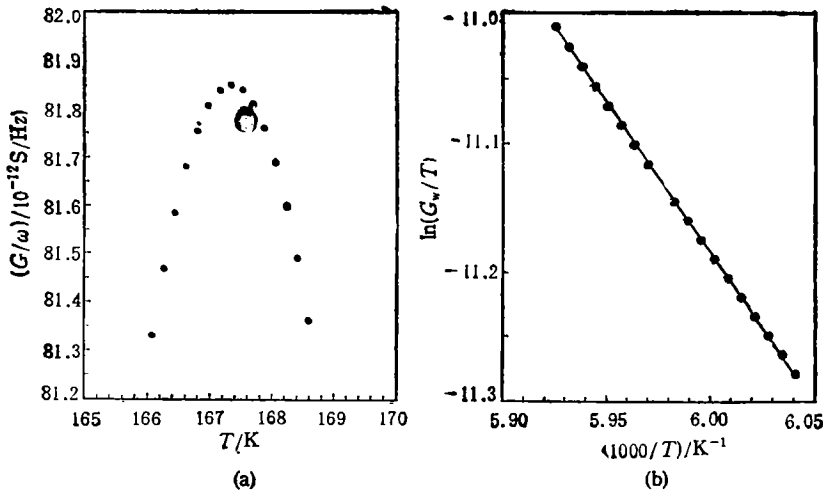


图 5 单频法 $\ln(G_w/T)-1/T$ 直线拟合图 曲线 a 为 1MHz ; 曲线 b 为 500kHz ; 曲线 c 为 300kHz ; 曲线 d 为 100kHz

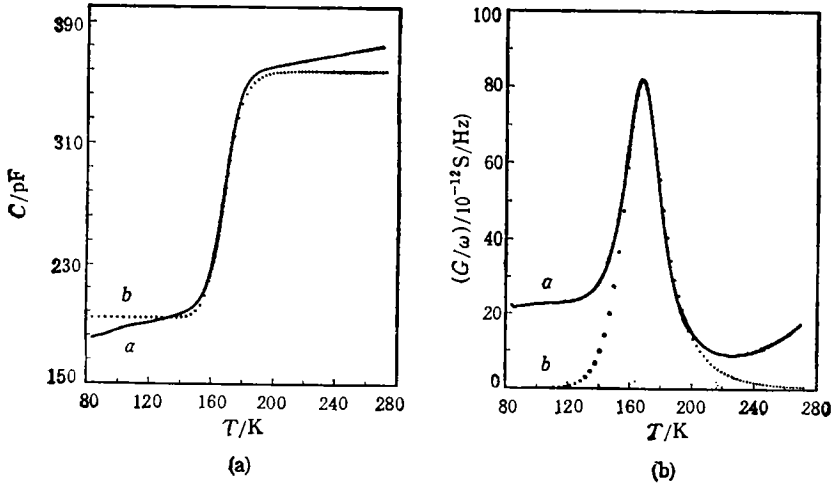


图 6 单频导纳谱理论模拟曲线 (b) 与实验曲线 (a) 的比较

就很小,直线的线性就要好得多,如图 5 (b) 所示。因此,单频法的计算结果要比多频法准确。

如果假设 C_d 与 C_w 不随温度变化,将用上述方法求得的 E_a 及 α 值代入(1)式,结合(2),(3)式就可直接模拟计算出 C_p-T 及 G_p-T 曲线。图 6 显示理论模拟曲线与实验曲线的比较。尽管 E_a 及 α 值是从导纳谱峰附近 3 K 温度范围内的 15 个数据点的处理计算得到,但由此得到的理论模拟曲线在较大的温度范围内与实验曲线还是十分符合的,说明图 1 所示的等效电路模型比较符合实际情况。在电容曲线上,高温端与低温端理论模拟与实验曲线的差别在于肖脱基势垒电容 C_d 随温度的变化,因为图 6 中理论模拟曲线是在 C_d 不随温度变化的条件下得到的。同样对于电导的实验曲线,在高温端和低温端并不趋于零,这是因为还必须考虑肖脱基的反向漏电流与势垒电容 C_d 随温度的变化很小,而量子阱电导 G_w 却随温度

指数变化,因此在电容跃变过程及导纳谱峰的温度范围内,样品的电容 C_p 及电导 G_p 随温度的变化主要是由 G_w 随温度的显著变化而引起。所以在单频导纳谱的数据处理中,近似认为在峰值温度附近 C_d 及 C_w 不随温度变化是完全可取的。

已知激活能 E_a 及所对应的温度 T_m ,就可用上节所述的方法,解泊松方程求得电势 $V(x)$ 及电场 $E(x)$ 的分布,并得到能带偏移值 $\Delta E_v = 0.16 \text{ eV}$ 。图 7 为计算所得的电势分布图,根据电势分布就可得到如图 2 所示的能带图。在计算中取费密能级 E_F 位置为能量零点。由计算结果可知费密能级位于 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 价带顶(即量子阱底)之上 0.04 eV 处,阱中平均载流子浓度为 $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 左右,而阱中的掺杂浓度仅为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$,因此这些载流子都是通过阱外向阱内转移而积累。由于载流子的转移,阱的两边出现耗尽,能带向下弯曲达 0.11 eV ,而阱内由于载流子的积累,能带弯曲仅 0.006 eV 。

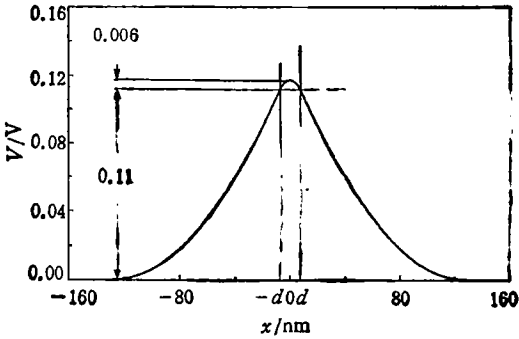


图 7 平衡时单量子阱电势分布图

五、 结 论

本文用单频导纳谱法对 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.33}\text{Si}_{0.67}/\text{Si}$ 单量子阱进行测试,得到其激活能 $E_a = 0.20 \text{ eV}$,通过解泊松方程,求得该量子阱的能带图,其中 $E_F - E_v = 0.04 \text{ eV}$,阱中的载流子浓度为 $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$,而掺杂浓度仅为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 。异质界面处阱的两边出现耗尽,能带向下弯曲达 0.11 eV ,阱内载流子积累引起能带弯曲仅 0.006 eV 。从中计算出 $\text{Ge}_{0.33}\text{Si}_{0.67}/\text{Si}$ 的能带偏移为 0.16 eV ,通过理论模拟计算的结果表明,单频导纳谱所采用的方法是切实可行的。

[1] H. Kroemer and Wu-Yi Chien, J. S. Harris, Jr. and D. D. Edwall, *Appl. Phys. Lett.*, 36(1980),

- [2] R. People, K. W. Wecht, K. Alavi and A. Y. Cho, *Appl. Phys. Lett.*, **43**(1983), 118.
- [3] H. Okumurd, S. Misawa, S. Yoshida and S. Gonda, *Appl. Phys. Lett.*, **46**(1985), 377.
- [4] Miyoko Oku Watanabe, Jiro Yoshida, Masao Mashita, Takatosi Nakanisi and Akimichi Hojo, *J. Appl. Phys.*, **57**(1985), 5340.
- [5] K. Nauka, T. L. Kamins, and J. E. Turner, C. A. King, J. L. Horst and J. F. Gibbons, *Appl. Phys. Lett.*, **60**(1992), 195.
- [6] N. Debbar, Dipankar Biswas and Pallab Bhattacharya, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 1058.
- [7] X. Letartre, D. Stievenard, M. Lannoo and D. Lippens, *J. Appl. Phys.*, **68**(1990), 116.

MEASUREMENT OF THE BAND OFFSET IN $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ SINGLE QUANTUM WELL BY USING SINGLE FREQUENCY ADMITTANCE SPECTROSCOPY

LU FANG JIANG JIA-YU GONG DA-WEI¹⁾ SUN HENG-HUI

Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433

1) *State Key Laboratory of Surface Physics, Fudan University, Shanghai 200433*

(Received 13 April 1993)

ABSTRACT

A single frequency admittance spectroscopy technique is introduced for determining the band discontinuity on $\text{Si}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ single quantum well (SQW). By using this method, the more accurate experimental results can be obtained from a single frequency admittance spectrum. For an alloy with composition $x = 0.33$, we get the activation energy $E_a = 0.20\text{eV}$. In order to obtain the value of the band offset, it is necessary to determine the position of Fermi level which depends on the dopant concentration inside and outside the well, the band offset of hetero-interface and temperature. By solving Poisson equation, we get the energy band diagram and Fermi level of the test sample. It is shown that the Fermi level lies about 40 meV above the top of valance band in the well. And due to the carrier transfer at the hetero-interface, the carrier concentration (about $2 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$) in the well is one order large than dopant concentration ($1 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$). The energy bands at two sides of the interfaces are bent by about 0.006 eV in the well and 0.11eV in the barrier, hence the valance band offset can be calculated as 0.16eV. The accuracy of this technique can also be verified from reconstruction of C - T and G - T curves by computer simulation.

PACC: 7280; 7940; 6865