

# 非掺杂型 Si/SiGe 异质结外延与表征\*

耿鑫<sup>1)2)</sup> 张结印<sup>2)†</sup> 卢文龙<sup>3)</sup> 明铭<sup>2)</sup> 刘方泽<sup>4)</sup> 符彬啸<sup>2)</sup>  
褚逸昕<sup>4)</sup> 颜谋回<sup>5)</sup> 王保传<sup>3)</sup> 张新定<sup>1)‡</sup> 郭国平<sup>3)</sup> 张建军<sup>2)4)††</sup>

1) (华南师范大学物理学院, 广州 510631)

2) (松山湖材料实验室, 半导体异质材料与器件中心, 东莞 523830)

3) (中国科学技术大学, 中国科学院量子信息重点实验室, 合肥 230026)

4) (中国科学院物理研究所, 纳米物理与器件重点实验室, 北京 100190)

5) (上海大学理学院, 上海 200444)

(2024年3月1日收到; 2024年3月29日收到修改稿)

以自旋为编码单元的硅基半导体量子计算与传统微电子工艺兼容, 易拓展且可以同位素纯化提高退相干时间, 因而备受关注. 本研究工作通过分子束外延生长了高质量非掺杂型 Si/SiGe 异质结并测试了二维电子气迁移率. 球差电镜观察到原子级尖锐界面, 原子力显微镜表征显示其表面均方根粗糙度仅为 0.44 nm, 低温下迁移率达到  $20.21 \times 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ . 不同栅压下载流子浓度和迁移率的幂指数为 1.026, 材料丁格比值在 7—12 之间, 表明载流子主要受到背景杂质散射和半导体/氧化物的界面散射.

**关键词:** Si/SiGe 异质结, 二维电子气, 霍尔迁移率, 硅基量子计算

**PACS:** 73.40.Lq, 73.43.-f, 85.30.Fg, 85.35.Be

**DOI:** 10.7498/aps.73.20240310

## 1 引言

半导体量子点量子计算与传统的微电子工艺兼容, 可拓展性强, 是实现固态量子计算的重要路线之一<sup>[1-3]</sup>. 用于半导体量子点量子计算的材料体系主要有 III-V 族 GaAs/AlGaAs<sup>[4,5]</sup>, InAs<sup>[6]</sup> 或 InSb 纳米线<sup>[7]</sup>, IV 族的 Si MOS<sup>[8]</sup>, Si/SiGe 二维异质结电子气<sup>[9]</sup>, Ge/SiGe 二维异质结空穴气<sup>[10]</sup>、原子掺杂的 Si 材料<sup>[11]</sup> 和 Ge 量子线<sup>[12-16]</sup> 等. 早期研究主要围绕着 III-V 族的 GaAs/AlGaAs 材料<sup>[17]</sup> 开展, 但栅控量子点中电子因受到电子自旋和核自旋超

精细作用的影响<sup>[4]</sup>, 退相干时间最高仅为 94 ns<sup>[17]</sup>. 相比于 III-V 材料, IV 族硅、锗材料中具有核自旋的稳定同位素丰度低 (<sup>29</sup>Si: 4.67%, <sup>73</sup>Ge: 7.76%) 且可以通过同位素纯化进一步获得无核自旋的 <sup>28</sup>Si 和 <sup>72</sup>Ge (或 <sup>70</sup>Ge, <sup>74</sup>Ge, <sup>76</sup>Ge), 大幅提高退相干时间, 实现高保真度门操作的量子比特.

在上述的众多用于半导体量子计算的 IV 族材料中, Si/SiGe 异质结二维电子气材料因具有高的迁移率及易于扩展和集成而备受关注, 近年来得到了快速的发展. 2016 年, Takeda 等<sup>[18]</sup> 基于非纯化的 Si/SiGe 异质结实现了电子自旋量子比特的电偶极自旋操控 (EDSR), 门操控保真度达到 99.6%.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 92165207, 62225407, 12304100)、松山湖材料实验室支持项目 (批准号: XMYS2023002) 和国家科创 2030 项目 (批准号: 2021ZD0302300) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhangjieyin@sslab.org.cn

‡ 通信作者. E-mail: xdzhang@scnu.edu.cn

†† 通信作者. E-mail: jjzhang@iphy.ac.cn

基于同位素纯化的<sup>28</sup>Si/SiGe 异质结, 该课题组在 2018 年将单比特门保真度进一步提高到大于 99.9%<sup>[19]</sup>. 2022 年, Xue 等<sup>[20]</sup>、Takeda 等<sup>[21]</sup> 和 Mills 等<sup>[22]</sup> 3 个团队基于<sup>28</sup>Si/SiGe 异质结分别实现了两比特门保真度大于 99%. 而且, Philips 等<sup>[23]</sup> 基于纯化的<sup>28</sup>Si/SiGe 异质结实现了线性排列的六量子比特.

高质量材料是进一步提升比特性能的关键. 目前用于量子点量子计算的 Si/SiGe 二维异质结材料主要是通过化学气相沉积 (CVD) 的生长方法获得, 工业级 CVD 制备的材料迁移率可以达到  $4.2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ <sup>[24]</sup>, 实验室用于制备量子点的材料迁移率记录值为  $6.5 \times 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ <sup>[25]</sup>. 分子束外延 (MBE) 是获得高迁移率异质结薄膜的主要手段, 基于 MBE 生长的 GaAs/AlGaAs 异质结二维电子气的迁移率达到  $4.4 \times 10^7 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ <sup>[26]</sup>. 然而, 基于 MBE 技术生长的掺杂型 Si/SiGe 目前报道的最高迁移率还只有  $3.2 \times 10^5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ <sup>[27]</sup>, MBE 外延非掺杂型 Si/SiGe 异质结研究工作也鲜有报道. 对于 Si/SiGe 异质结, 理论和实验研究表明界面台阶可以调节谷分裂能<sup>[28]</sup>. 分子束外延技术在界面调控具有显著优势, 将有助于研究更精细的谷态物理性质. 本研究利用 MBE 技术在 Si 基 SiGe 虚拟衬底上外延了 Si/SiGe 异质结结构, 并利用扫

描隧道显微镜 (STEM), 原子力显微镜 (AFM) 和 X 射线衍射 (XRD) 等表征技术分析材料的界面、表面形貌、组分及应变. 通过微纳加工技术制备霍尔器件并进行低温输运测量, 二维电子气迁移率达到  $20.21 \times 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ . 提取了渗透密度、载流子有效质量, 分析了载流子浓度和迁移率的幂指数关系和丁格比等. 本研究对 MBE 生长的 Si/SiGe 材料进行了系统的研究, 对进一步提升异质结材料迁移率及其在半导体量子点量子计算应用具有重要意义.

## 2 实验方法

如图 1(a) 所示, 虚线框里的外延结构是 MBE 制备, 下面的硅基 Si<sub>0.73</sub>Ge<sub>0.27</sub> 虚拟衬底由北京超弦存储器研究院王桂磊研究员和中国科学院微电子研究所孔真真团队通过减压化学气相沉积 (RPCVD) 制备. 利用 RPCVD 在 Si(001) 衬底上渐变沉积 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $x = 0-0.27$ ) 缓慢释放应变, 随后生长固定 Si<sub>0.73</sub>Ge<sub>0.27</sub> 缓冲层, 采用化学机械抛光工艺 (chemical mechanical polishing, CMP) 提高表面平整度 (均方根粗糙度为 0.292 nm). 经过 RCA 标准清洗工艺去除表面杂质, 再使用 5% 氢氟酸漂洗

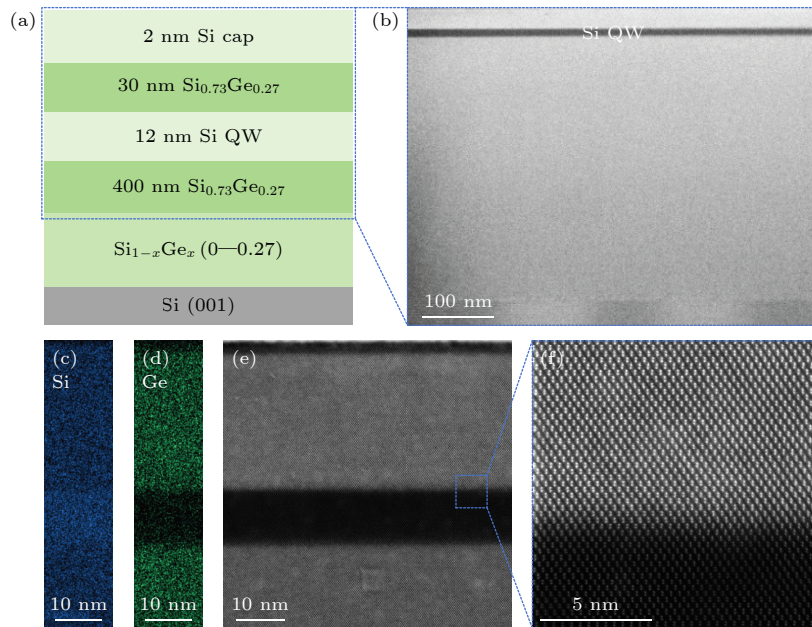


图 1 (a) 硅基 Si/SiGe 异质结结构示意图; (b) MBE 制备 SiGe/Si QW/SiGe/Si 结构的 STEM-HAADF 图; (c), (d) 量子阱附近 Si, Ge 元素的 EDS 谱; (e) SiGe/Si/SiGe 高倍 STEM-HAADF 图像; (f) Si 量子阱上界面的 STEM-HAADF 原子图像

Fig. 1. (a) Schematic of Si/SiGe heterostructure on Si (001); (b) STEM-HAADF of SiGe/Si QW/SiGe/Si heterostructure grown by MBE; (c), (d) EDS of Si and Ge distribution around quantum well; (e) magnified STEM-HAADF of SiGe/Si/SiGe; (f) atomic-scale STEM-HAADF image of the Si/SiGe interface.

1 min, 去除表面氧化层并形成氢键钝化的表面. 传入分子束外延设备进行后续外延生长, 生长腔室背景真空为  $6 \times 10^{-11}$  mbar (1 bar =  $10^5$  Pa). 首先将衬底温度升至 400 °C 除气 15 min, 再将衬底温度升至 700 °C 使表面氢键脱附, 然后在 500 °C 以 Si 0.41 Å/s, Ge 0.15 Å/s 的生长速率依次沉积 400 nm  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  缓冲层, 12 nm 应变 Si 层, 30 nm  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  间隔层以及 2 nm Si 盖层, 其中量子阱生长背景真空为  $1.5 \times 10^{-9}$  mbar.

器件的制备方面, 利用激光直写和反应离子刻蚀将异质结材料加工成纵向长度为 800  $\mu\text{m}$ , 横向宽度为 200  $\mu\text{m}$  的霍尔器件. 欧姆接触采用离子注入工艺, 将磷 (P) 元素注入到欧姆接触特定位置, 并在 700 °C 温度下进行退火 30 s 激活. 通过电子束蒸发技术沉积 Ti/Au 层 (10 nm/70 nm) 作为金属电极, 通过原子层沉积技术生长 30 nm  $\text{Al}_2\text{O}_3$  作为介电层. 最后, 通过电子束蒸发沉积 Ti/Au 层 (10 nm/70 nm) 作为顶栅电极, 形成 Hall-bar 结构. Si/SiGe 异质结霍尔器件的电输运测试是在最低温度可到 250 mK 的无液氦低温系统中完成.

### 3 实验结果与分析

#### 3.1 Si/SiGe 异质结结构、形貌和组分表征

对样品进行聚焦离子束 (FIB) 制样后, 使用 STEM-HAADF 对样品进行表征. 如图 1(b) 所示, 底部区域可以看到明显的 CVD 和 MBE 外延的界面. 界面上部是 MBE 制备的固定 Ge 含量的  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  薄膜层, 截面 HAADF 图像中没有观察到位错的存在, 表明薄膜具有高的晶体质量. 图 1(b)

顶部区域可以看到明显的 Si 量子阱 (黑色) 和  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  层的界面. 图 1(c), (d) 分别表示与高倍的 STEM-HAADF 图 1(e) 相对应的量子阱附近 Si, Ge 元素的能谱 (EDS), 图像的明暗程度定性反映相对应元素分布量多少, 图中可以清晰看到界面处的明暗交界. 图 1(f) 是量子阱上界面高倍原子尺度成像, 观察到从应变 Si 层到 SiGe 间隔层界面厚度仅有几个原子层, 并且在图像上没有看到缺陷信息, 说明生长的量子阱结构界面清晰, 质量高. 量子阱中硅原子的排列和  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  薄膜层中原子排列完全共格, 处于完全应变状态. 实验同时根据误差函数拟合<sup>[29]</sup> 硅含量变化的 EDX 数据, 量子阱上界面特征长度为 0.53 nm, 定量验证了外延制备的原子级尖锐的 Si/SiGe 异质结界面.

图 2(a) 展示了材料表面 5  $\mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$  的 AFM 图像. 样品表面起伏小, 平整度高, 其均方根粗糙度 (RMS roughness) 仅为 0.44 nm. 图 2(b) 是沿着  $(\bar{2}, \bar{2}, 4)$  方向对材料进行 X 射线衍射倒易空间图像 (XRD-RSM), 横坐标  $Q_x$  纵坐标  $Q_z$  分别是衍射矢量在面内、面外的分量. 从图像可以分析材料生长结构为硅衬底逐渐变到锗含量为 0.27 的  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  薄膜层. 分子束外延的固定含量的 SiGe 薄膜层和 CVD 的 SiGe 薄膜层信号重合, 两者锗含量一致. 在  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  信号峰的上方, 有微弱的硅量子阱信号峰. 多个信号峰的出现是由于 X 射线信号在量子阱界面引起了干涉效应. 硅量子阱处于  $\text{Si}_{0.73}\text{Ge}_{0.27}$  薄膜信号峰正上方, 表明处于面内完全拉应变状态, 应变值为 1.03%.

#### 3.2 Si/SiGe 异质结电输运表征

低温电学测量可通过调节栅极电压来调节硅

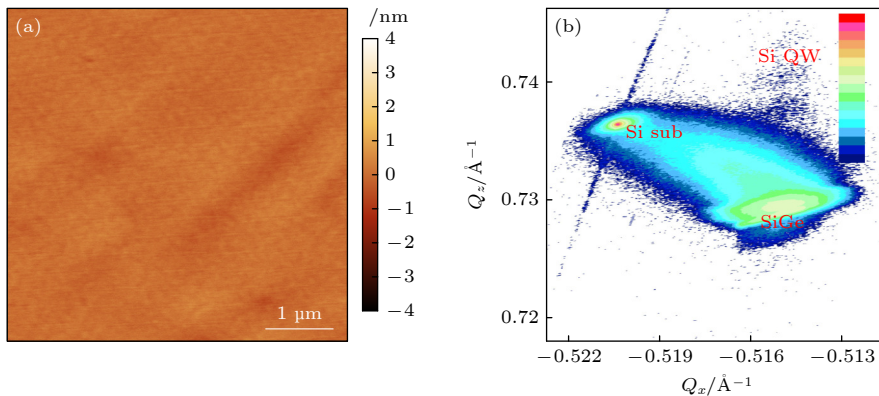


图 2 (a) 样品表面的原子力显微镜图像; (b)  $(\bar{2}, \bar{2}, 4)$  方向 XRD-RSM 图

Fig. 2. (a) Surface morphology of the heterostructure measured by AFM; (b) RSM around the asymmetric  $(\bar{2}, \bar{2}, 4)$  direction of the heterostructure.

量子阱沟道中的载流子浓度. 图 3(a) 是霍尔器件的光显图及截面示意图, 源漏极分别在器件的两侧. 截面示意图从左到右显示的是光显图中红线代表的从栅极到漏极的截面结构. 图 3(b) 显示了 250 mK 的温度下载流子浓度  $n_{2D}$  和迁移率  $\mu$  随栅极电压  $V_g$  变化时的曲线. 根据  $V_g$ - $n_{2D}$  斜率拟合得出电容为  $4.0133 \times 10^{-11}$  F/cm<sup>2</sup>, 而根据平行板电容器模型计算电容为  $4.5013 \times 10^{-11}$  F/cm<sup>2</sup>, 实际结果与理论结果基本一致. 250 mK 温度下  $\mu$  随着  $n_{2D}$  变化的关系如图 3(c) 所示, 根据载流子浓度和迁移率关

系的幂律函数公式  $\mu \propto n_{2D}^\alpha$  拟合, 幂指数拟合值  $\alpha = 1.026$ . 数值介于背景散射对应理论值 0.5 和氧化物/半导体界面远端散射对应理论值 1.5 中间, 这表明  $3.2 \times 10^{11}$ — $5.6 \times 10^{11}$  cm<sup>-2</sup> 范围内的载流子迁移率主要受背景散射和半导体/氧化物界面散射共同影响<sup>[30]</sup>. 图 3(d) 是以电导率  $\sigma_{xx}$ , 载流子浓度  $n_{2D}$  为坐标轴的图像, 黑点是实际  $\sigma_{xx}$  与  $n_{2D}$  对应的数据点, 虚线是根据<sup>[31]</sup> 渗透理论  $\sigma_{xx} \propto (n_{2D} - n_p)^{1.31}$  拟合出的曲线. 由公式拟合得出<sup>[32]</sup> 渗透密度  $n_p = 1.465 \times 10^{11}$  cm<sup>-2</sup>. 进一步增大栅极电压到 2 V, 250 mK 温

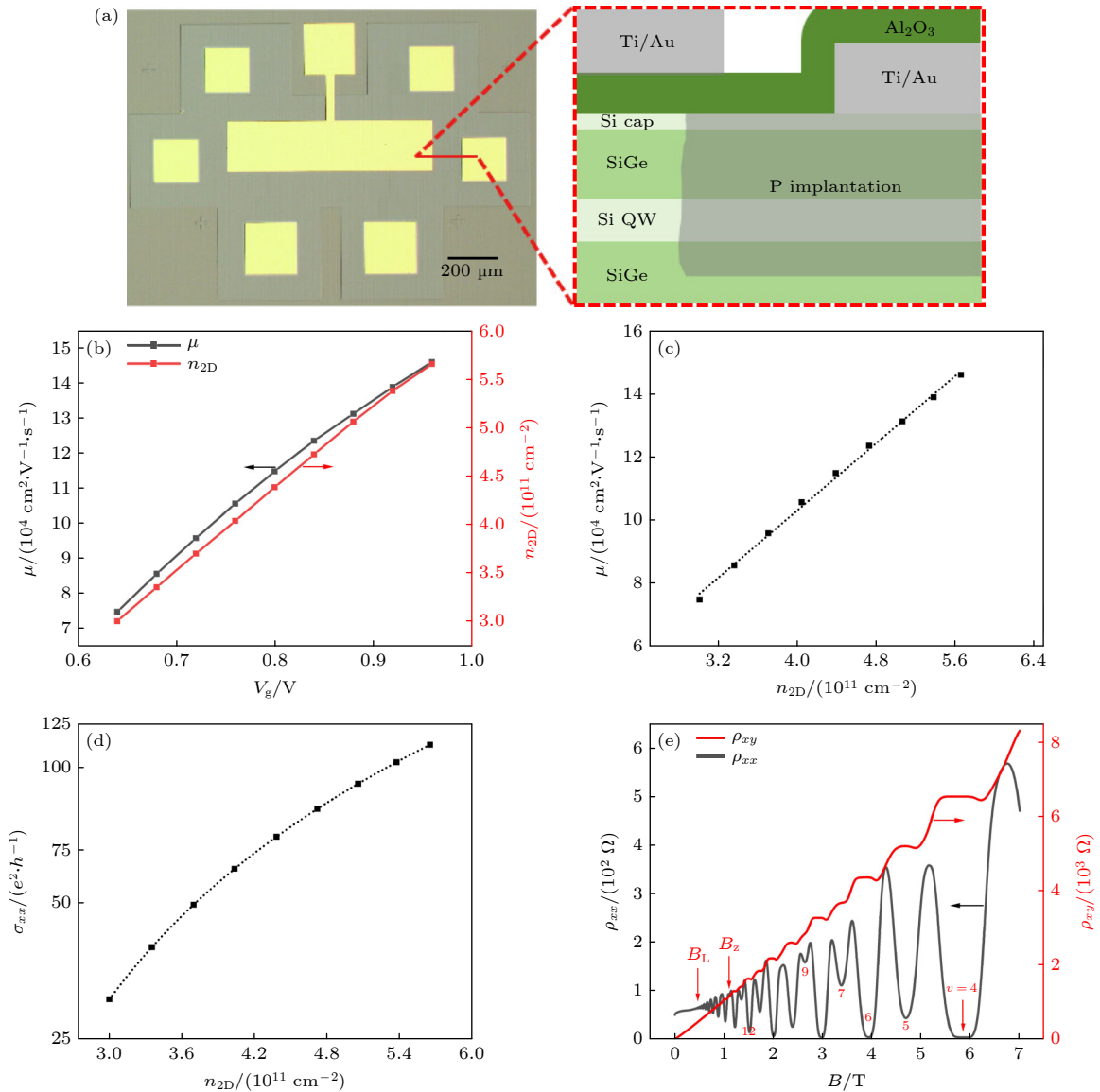


图 3 (a) 霍尔器件的光显图和截面示意图; (b) 载流子浓度和载流子迁移率随栅极电压变化的曲线; (c) 载流子迁移率与载流子浓度的对应关系曲线; (d) 纵向电导率随载流子浓度变化的关系 (虚线是根据渗透理论拟合的曲线); (e) 栅极电压为 2 V 时的纵向电阻率和横向电阻率随磁场的变化

Fig. 3. (a) Optical microscope diagram and cross-sectional schematic view of Hall device; (b) carrier density and mobility as a function of the gate voltage  $V_g$ ; (c) density-dependent mobility; (d) density-dependent conductivity, the dashed line is a fit based on the percolation theory; (e) transverse Hall resistivity and longitudinal resistivity as a function of the magnetic field.

度条件下测量  $\rho_{xx}$ ,  $\rho_{xy}$  随着  $B$  变化的关系, 结果见图 3(e). 可以观察到经典的 SdH 振荡 (Shubnikov de Haas oscillations), 在  $B = 0.3745$  T 时是 SdH 起振点,  $B = 1.104$  T 时出现了塞曼分裂点. 计算得到载流子浓度为  $6.265 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , 载流子迁移率峰值为  $20.21 \times 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ .

进一步, 通过下面的公式拟合 SdH 振荡的热阻尼曲线, 可以提取电子的有效质量:

$$\frac{\Delta\rho_{xx}}{\Delta\rho_0} = \frac{T \cdot \sinh(\varphi \cdot T_0)}{T_0 \cdot \sinh(\varphi \cdot T)},$$

式中,  $\Delta\rho_0$  是去除背景噪声后场强为零时的电阻率,  $T_0$  是测量振荡时的最低温度, 这里  $T_0 = 0.25$  K, 式中  $\varphi = \frac{2\pi^2 k_B m^*}{\hbar e B}$ , 其中  $k_B$  是玻尔兹曼常数,  $\hbar$  是约化的普朗克常量,  $e$  是电子电荷. 图 4(a) 显示载流子浓度为  $5.472 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  时不同温度条件下的 SdH 振荡曲线, 图 4(b) 则是去除背景噪音 [33,34] 后不同温度下的 SdH 振荡曲线. 图 4(c) 是  $\Delta\rho_{xx}/\Delta\rho_0$  在不同磁场强度的条件下随着温度变化的数据点,

虚线是根据拟合得到的曲线. 根据拟合曲线计算在该磁场强度下的有效质量  $m^*$ . 通过变换栅极电压改变载流子浓度, 测量不同载流子浓度下有效质量  $m^*$  随磁场的变化 (图 4(d)). 计算得到有效质量变化范围为  $0.17m_0$ — $0.21m_0$ , 和文献中 [34] 基本一致. 有效质量数值低, 表明电子主要填充在因应变导致硅六重简并分裂后的二重简并态的能谷处.

图 5(a) 显示  $T = 0.25$  K 时, 不同载流子浓度在低磁场下的 SdH 振荡曲线. 载流子浓度越高, 振荡周期越小. 由图 4(d) 可知, 二维电子气有效质量在  $0.17m_0$ — $0.21m_0$ , 有效质量只在较小范围内波动, 可以推断出有效质量的变化对计算量子寿命  $\tau_q$  的影响很小. 假设有效质量  $m^*$  是一个定值 [34], 大小为  $0.21 m_0$ , 根据以上假设得到  $\ln\left(\frac{\Delta\rho_{xx} \sinh(\alpha T_0)}{\alpha T_0}\right)$  随着  $1/B$  变化的曲线图 5(b). 通过拟合得到图 5(b) 中的斜率  $k$ , 计算出量子寿命  $\tau_q$ . 根据公式  $\tau_l = \mu m^*/e$  可以获得载流子的输运寿命  $\tau_l$ . 如图 5(c) 所示,  $\tau_q$  几乎不随载流子浓度变化, 而  $\tau_l$  随着载流子浓度

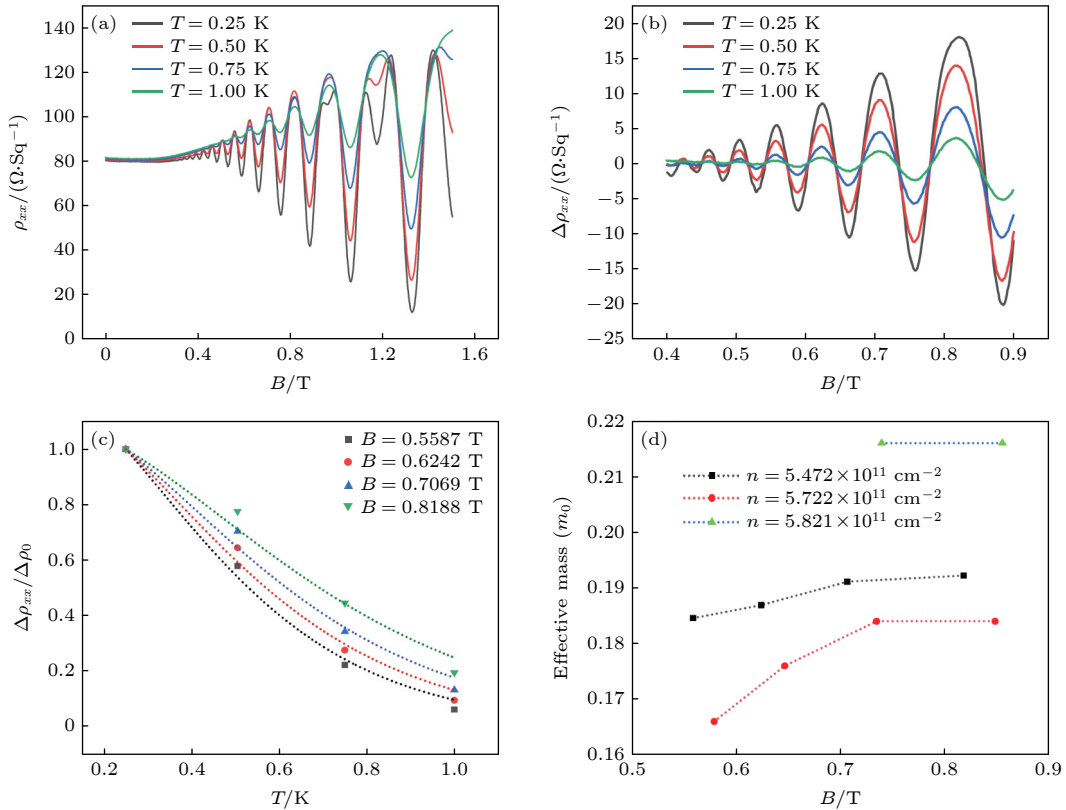


图 4 (a) 不同温度下 SdH 振荡曲线; (b) 不同温度下去除噪音的 SdH 振荡曲线; (c)  $\Delta\rho_{xx}/\Delta\rho_0$  在不同磁场强度下随温度的变换曲线; (d) 不同载流子浓度下有效质量  $m^*$  随磁场  $B$  的变化

Fig. 4. (a) Longitudinal resistivity as a function of magnetic field for different temperatures; (b) oscillation amplitude of the longitudinal resistivity as a function of the magnetic field; (c)  $\Delta\rho_{xx}/\Delta\rho_0$  for different temperatures, different colors represent different magnetic fields from 0.55 T to 0.82 T, dashed lines are the fits for extracting effective mass; (d) effective mass as a function of the magnetic field at various densities.

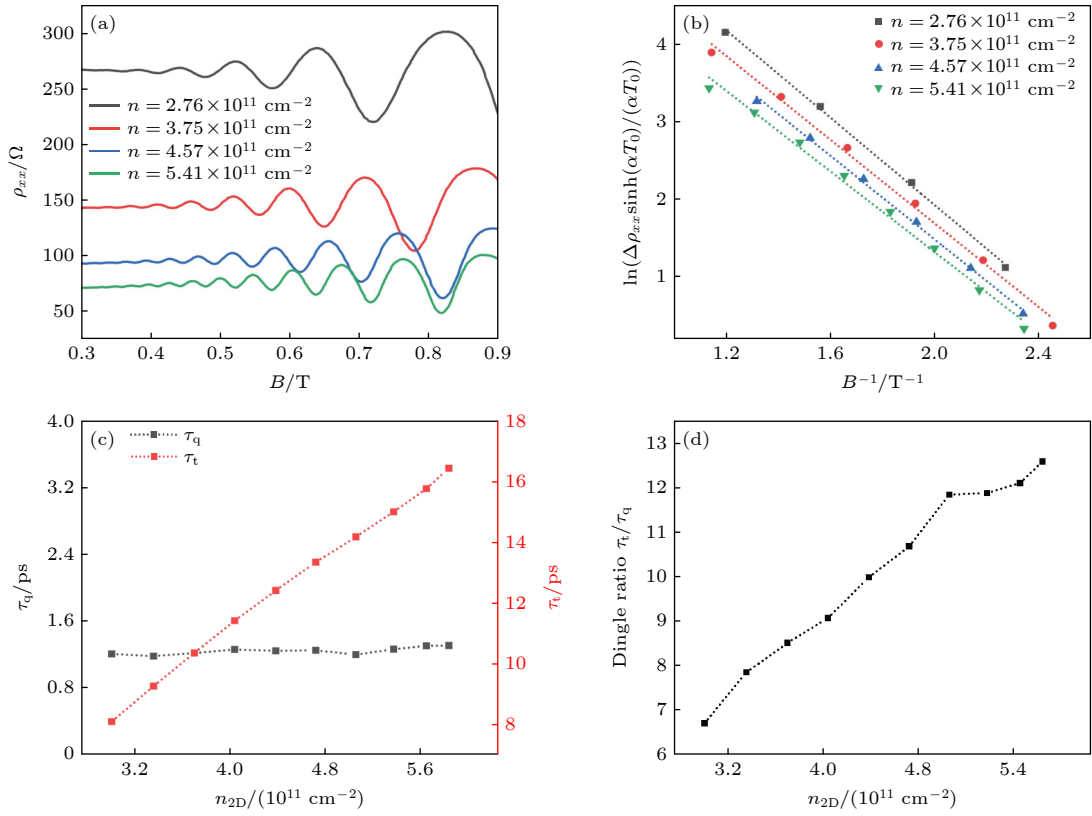


图 5 (a) 不同载流子浓度下的 Sdh 振荡曲线; (b) 不同载流子浓度下  $\ln\left(\frac{\Delta\rho_{xx}\sinh(\alpha T_0)}{\alpha T_0}\right)$  随  $1/B$  的变化曲线; (c) 量子寿命  $\tau_q$ ,  $\tau_t$  随着载流子浓度变化的曲线; (d) 丁格比 ( $\tau_q/\tau_t$ ) 随载流子浓度的变化曲线

Fig. 5. (a) Longitudinal resistivity as a function of magnetic field under various carrier densities; (b) the variation curve of  $\ln\left(\frac{\Delta\rho_{xx}\sinh(\alpha T_0)}{\alpha T_0}\right)$  with  $1/B$  under different carrier densities; (c)  $\tau_q$  and  $\tau_t$  at different carrier densities; (d) carrier density-dependent Dingle plot ( $\tau_q/\tau_t$ ).

的升高不断变大<sup>[35]</sup>. 根据图 5(c)可以得到丁格比随着载流子浓度变化(图 5(d)). 随着载流子浓度升高, 丁格比逐渐增大. 丁格比在 7—13 之间, 表明二维电子气载流子迁移率主要受背景杂质散射和半导体/氧化物界面散射影响<sup>[36]</sup>.

## 4 展望和结论

研究通过分子束外延技术在 Si 基 SiGe 虚拟衬底上外延制备了表面高平整度、原子级尖锐界面的 Si/SiGe 异质结构, 界面特征长度仅为 0.53 nm. 低温电学测量显示载流子浓度  $6.265 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  时, 迁移率达到  $20.21 \times 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , 渗透密度为  $1.465 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . 载流子浓度和迁移率的幂指数关系 (1.026) 和丁格比 (7—13) 表明目前载流子主要受到背景散射和氧化物/半导体界面的散射. 研究为进一步优化材料、研究更精细的谷态物理性质和后续制备量子点量子计算器件提供了基础.

## 参考文献

- [1] Wang N, Wang B C, Guo G P 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 230301 (in Chinese) [王宁, 王保传, 郭国平 2022 物理学报 **71** 230301]
- [2] Zhang J J, Li H O, Guo G P 2024 *Sci. Sin. Inf.* **54** 102
- [3] Zhang J Y, Gao F, Zhang J J 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 217802 (in Chinese) [张结印, 高飞, 张建军 2021 物理学报 **70** 217802]
- [4] Petta J, Johnson A, Taylor J, Laird E, Yacoby A, Lukin M, Marcus C, Hanson M, Gossard A 2005 *Science* **309** 2180
- [5] Yoneda J, Otsuka T, Nakajima T, Takakura T, Obata T, Pioro-Ladrière M, Lu H, Palmström C J, Gossard A C, Tarucha S 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 267601
- [6] Nadj-Perge S, Frolov S M, Bakkers E P, Kouwenhoven L P 2010 *Nature* **468** 1084
- [7] van den Berg J W G, Nadj-Perge S, Pribiag V S, Plissard S R, Bakkers E P A M, Frolov S M, Kouwenhoven L P 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 066806
- [8] Li R, Hudson F E, Dzurak A S, Hamilton A R 2015 *Nano Lett.* **15** 7314
- [9] Borselli M G, Eng K, Croke E T, Maune B M, Huang B, Ross R S, Kiselev A A, Deelman P W, Alvarado-Rodriguez I, Schmitz A E, Sokolich M, Holabird K S, Hazard T M, Gyure M F, Hunter A T 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 063109
- [10] Hendrickx N W, Lawrie W I L, Russ M, van Riggelen F, de Snoo S L, Schouten R N, Sammak A, Scappucci G, Veldhorst M 2021 *Nature* **591** 580

- [11] Madzik M T, Asaad S, Youssry A, Joecker B, Rudinger K M, Nielsen E, Young K C, Proctor T J, Baczewski A D, Laucht A, Schmitt V, Hudson F E, Itoh K M, Jakob A M, Johnson B C, Jamieson D N, Dzurak A S, Ferrie C, Blume-Kohout R, Morello A 2022 *Nature* **601** 348
- [12] Gao F, Feng Q, Wang T, Zhang J J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 028102 (in Chinese) [高飞, 冯琦, 王霆, 张建军 2020 物理学报 **69** 028102]
- [13] Xu G, Gao F, Wang K, Zhang T, Liu H, Cao G, Wang T, Zhang J J, Jiang H W, Li H O, Guo G P 2020 *Appl. Phys. Express* **13** 065002
- [14] Xu G, Li Y, Gao F, Li H O, Liu H, Wang K, Cao G, Wang T, Zhang J J, Guo G C, Guo G P 2020 *New J. Phys.* **22** 083068
- [15] Wang K, Xu G, Gao F, Liu H, Ma R L, Zhang X, Wang Z, Cao G, Wang T, Zhang J J, Culcer D, Hu X, Jiang H W, Li H O, Guo G C, Guo G P 2022 *Nat. Commun.* **13** 206
- [16] Watzinger H, Kukučka J, Vukušić L, Gao F, Wang T, Schäffler F, Zhang J J, Katsaros G 2018 *Nat. Commun.* **9** 3902
- [17] Stano P, Loss D 2022 *Nat. Rev. Phys.* **4** 672
- [18] Takeda K, Kamioka J, Otsuka T, Yoneda J, Nakajima T, Delbecq M R, Amaha S, Allison G, Kodera T, Oda S, Tarucha S 2016 *Sci. Adv.* **2** e1600694
- [19] Yoneda J, Takeda K, Otsuka T, Nakajima T, Delbecq M R, Allison G, Honda T, Kodera T, Oda S, Hoshii Y, Usami N, Itoh K M, Tarucha S 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 102
- [20] Xue X, Russ M, Samkharadze N, Undseth B, Sammak A, Scappucci G, Vandersypen L M K 2022 *Nature* **601** 343
- [21] Takeda K, Noiri A, Nakajima T, Kobayashi T, Tarucha S 2022 *Nature* **608** 682
- [22] Mills A R, Guim C R, Gullans M J, Sigillito A J, Feldman M M, Nielsen E, Petta J R 2022 *Sci. Adv.* **8** 5
- [23] Philips S G J, Mądzik M T, Amitonov S V, de Snoo S L, Russ M, Kalhor N, Volk C, Lawrie W I L, Brousse D, Trypuzen L, Wuetz B P, Sammak A, Veldhorst M, Scappucci G, Vandersypen L M K 2022 *Nature* **609** 919
- [24] Paquelet Wuetz B, Bavdaz P L, Yeoh L A, Schouten R, van der Does H, Tiggelman M, Sabbagh D, Sammak A, Almudever C G, Sebastiano F, Clarke J S, Veldhorst M, Scappucci G 2020 *NPJ Quantum Inf.* **6** 43
- [25] Mi X, Cady J V, Zajac D M, Stehlik J, Edge L F, Petta J R 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 043502
- [26] Chung Y J, Villegas Rosales K A, Baldwin K W, Madathil P T, West K W, Shayegan M, Pfeiffer L N 2021 *Nat. Mater.* **20** 632
- [27] Weitz P, Haug R J, von Klitzing K, Schäffler F 1996 *Surf. Sci.* **361-362** 542
- [28] Goswami S, Slinker K A, Friesen M, McGuire L M, Truitt J L, Tahan C, Klein L J, Chu J O, Mooney P M, van der Weide D W, Joynt R, Coppersmith S N, Eriksson M A 2007 *Nat. Phys.* **3** 41
- [29] Zhang D D, Lu J, Liu Z, Wan F S, Liu X Q, Pang Y Q, Zhu Y P, Cheng B W, Zheng J, Zuo Y H, Xue C L 2022 *Appl. Phys. Lett.* **121** 6
- [30] Laroche D, Huang S H, Nielsen E, Chuang Y, Li J Y, Liu C W, Lu T M 2015 *AIP Adv.* **5** 107106
- [31] Tracy L A, Hwang E H, Eng K, Ten Eyck G A, Nordberg E P, Childs K, Carroll M S, Lilly M P, Das Sarma S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 235307
- [32] Kim J S, Tyryshkin A M, Lyon S A 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 123505
- [33] Coleridge P T 1990 *Semicond. Sci. Technol.* **5** 961
- [34] Mi X, Hazard T M, Payette C, Wang K, Zajac D M, Cady J V, Petta J R 2015 *Phys. Rev. B* **92** 035304
- [35] Wang K, Li H O, Luo G, Zhang X, Jing F M, Hu R Z, Zhou Y, Liu H, Wang G L, Cao G, Jiang H W, Guo G P 2020 *Europhys. Lett.* **130** 27001
- [36] Monroe D, Xie Y H, Fitzgerald E A, Silverman P J, Watson G P 1993 *J. Vac. Sci. Technol. B: Microelectron. Nanometer Struct.—Process. Meas. Phenom.* **11** 1731

# Epitaxy and characterization of undoped Si/SiGe heterojunctions\*

Geng Xin<sup>1)2)</sup> Zhang Jie-Yin<sup>2)†</sup> Lu Wen-Long<sup>3)</sup> Ming Ming<sup>2)</sup> Liu Fang-Ze<sup>4)</sup>

Fu Bin-Xiao<sup>2)</sup> Chu Yi-Xin<sup>4)</sup> Yan Mou-Hui<sup>5)</sup> Wang Bao-Chuan<sup>3)</sup>

Zhang Xin-Ding<sup>1)‡</sup> Guo Guo-Ping<sup>3)</sup> Zhang Jian-Jun<sup>2)4)††</sup>

1) (School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510631, China)

2) (Center for Semiconductor Heterogeneous Materials and Devices, Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523830, China)

3) (CAS Key Laboratory of Quantum Information, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

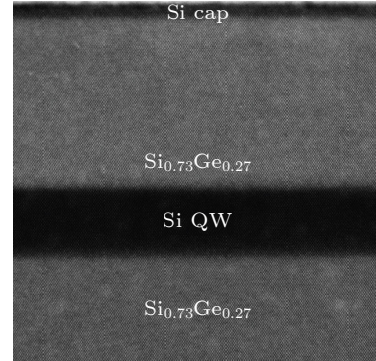
4) (Key Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

5) (College of Sciences, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

(Received 1 March 2024; revised manuscript received 29 March 2024)

## Abstract

Silicon-based semiconductor quantum computing with spin as the encoding unit is compatible with traditional microelectronic processes, easy to expand, and can improve isotope purification and decoherence time, thus attracting much attention. There are fewer reports on the work related to undoped Si/SiGe heterostructures grown by molecular beam epitaxy than those on chemical vapor deposition. An undoped Si/SiGe heterostructure is grown by molecular beam epitaxy (see the attached figure below). The results from scanning transmission electron microscopy and energy-dispersive spectroscopy mapping show an atomic-scale interface with a characteristic length of 0.53 nm. The surface root-mean-square roughness measured by atomic force microscope is 0.44 nm. The X-ray diffraction data show that the Si quantum well is fully strained and the in-plane strain is 1.03%. In addition, the performance of the two-dimensional electron gas is evaluated by low-temperature Hall measurements, which are conducted in the Hall-bar shaped field-effect transistor. The peak mobility is  $20.21 \times 10^4 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  when the carrier density is about  $6.265 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  at 250 mK. The percolation density is  $1.465 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . The effective mass of the two-dimensional electron gas is approximately  $0.19m_0$ . The power exponential between carrier density and mobility at different gate voltages is 1.026, and the Dingle ratio of the two-dimensional electron gas is in a range of 7–12, indicating that the electrons are scattered by background impurities and semiconductor/oxide interfaces charges. The atomically sharp interface of Si/SiGe heterostructures created by molecular beam epitaxy is beneficial for studying the valley physics properties in silicon. The structural and transport characterizations in this paper lay the foundation for the optimization of Si-based semiconductor quantum dot quantum computing materials.



**Keywords:** Si/SiGe heterojunction, two-dimensional electronic gas, Hall mobility, Si-based quantum computing

**PACS:** 73.40.Lq, 73.43.-f, 85.30.Fg, 85.35.Be

**DOI:** [10.7498/aps.73.20240310](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240310)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 92165207, 62225407, 12304100), the Songshan Lake Materials Laboratory, China (Grant No. XMYS2023002), and the Innovation Program for Quantum Science and Technology, China (Grant No. 2021ZD0302300).

† Corresponding author. E-mail: [zhangjieyin@sslslab.org.cn](mailto:zhangjieyin@sslslab.org.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [xdzhang@scnu.edu.cn](mailto:xdzhang@scnu.edu.cn)

†† Corresponding author. E-mail: [jjzhang@iphy.ac.cn](mailto:jjzhang@iphy.ac.cn)





## 非掺杂型Si/SiGe异质结外延与表征

耿鑫 张结印 卢文龙 明铭 刘方泽 符彬啸 褚逸昕 颜谋回 王保传 张新定 郭国平 张建军

### Epitaxy and characterization of undoped Si/SiGe heterojunctions

Geng Xin Zhang Jie-Yin Lu Wen-Long Ming Ming Liu Fang-Ze Fu Bin-Xiao Chu Yi-Xin Yan Mou-Hui Wang Bao-Chuan Zhang Xin-Ding Guo Guo-Ping Zhang Jian-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 117302 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240310

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240310>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

磷化铟高电子迁移率晶体管外延结构材料抗电子辐照加固设计

Structure parameters design of InP based high electron mobility transistor epitaxial materials to improve radiation-resistance ability  
物理学报. 2022, 71(3): 037202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211265>

AlGaIn/GaN高电子迁移率晶体管中二维电子气的极化光学声子散射

Polar optical phonon scattering of two-dimensional electron gas in AlGaIn/GaN high electron mobility transistor  
物理学报. 2020, 69(15): 157303 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200250>

二维kagome晶格过渡金属酞菁基异质结的电子性质

Electronic properties of two-dimensional kagome lattice based on transition metal phthalocyanine heterojunctions  
物理学报. 2023, 72(24): 247502 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230921>

利用脉冲激光沉积外延制备CsSnBr<sub>3</sub>/Si异质结高性能光电探测器

High-performance CsSnBr<sub>3</sub>/Si PN heterojunction photodetectors prepared by pulsed laser deposition epitaxy  
物理学报. 2024, 73(5): 058503 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231645>

钙钛矿超晶格材料界面二维电子气的调控

Tuning two-dimensional electron gas at LaAlO<sub>3</sub>/KNbO<sub>3</sub> interface by strain gradient  
物理学报. 2023, 72(17): 176801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230573>

氧化物异质界面上的准二维超导

Quasi-two-dimensional superconductivity at oxide heterostructures  
物理学报. 2023, 72(9): 097401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230044>