

GaAs/AlGaAs 二维电子气(2DEG) 散射机理研究

杨 斌 陈涌海 王占国 梁基本 廖奇为 林兰英

(中国科学院半导体研究所 半导体材料科学实验室 北京 100083)

摘要 本文采用三角阱近似,计算了 GaAs/AlGaAs 二维电子气(2DEG)电子只占据基态子带时,由极性光学声子、声学形变势、声学压电势、远程电离杂质、本底电离杂质、合金无序以及界面粗糙等七种主要的散射机制决定的电子迁移率与温度、2DEG 浓度、本底电离杂质浓度、以及界面不平整度等的关系.理论计算结果与实验符合很好.就作者所知考虑上述七种散射机制计算 2DEG 电子迁移率的工作,以前未见报道.

PACC: 7210

1 引言

影响 GaAs/AlGaAs 二维电子气(2DEG)电子迁移率的主要散射机制有以下八种:(I)声学形变势散射;(II)声学压电势散射;(III)极性光学声子散射;(IV)远程电离杂质散射;(V)本底电离杂质散射;(VI)合金散射;(VII)界面粗糙散射;(VIII)带间散射. Basu^[1]和 Price^[2,3]讨论了(I),(II),(III)这三种声子散射机制,T. Ando^[4]讨论了(IV),(VI),(VII)三种散射机制;W. Walukiewicz^[5]等人则在上述工作的基础上,假设 GaAs/AlGaAs 界面为理想界面,计算了 2DEG 电子迁移率.但他们的计算结果与实验规律符合不好.我们认为,这可能是由于实际 GaAs/AlGaAs 界面有一定的粗糙度,当 N_s 较大时,界面粗糙散射不能忽略的缘故.因此,本文计算了由(I)~(VII)这七种散射机制决定的电子迁移率,得到了与实验规律一致的结果.象本文这样全面考虑以上七种散射机理系统地讨论(2DEG)电子迁移率与温度、2DEG 浓度、本底电离杂质浓度和界面粗糙度等因素的关系的工作,文献中尚未看到.

2 散射机理

对于 GaAs/AlGaAs 2DEG 异质结,Z 方向形成准二维子带,电子的能量为:

杨 斌 男,1966年生,博士生,从事半导体超薄层材料与器件方面的研究工作
陈涌海 男,1967年生,研究实习员,从事 GaAs 材料与器件关系研究
1994年2月5日收到初稿,1994年5月9日收到修改稿

$$E_K(\vec{k}) = E_K + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1)$$

其中 $K=1, 2, 3, \dots$, $\vec{k}$ 为二维波矢量, m^* 为电子有效质量, $m^* = 0.067m_0$.

采用三角阱近似, 基态波函数 $\varphi_0(\vec{R}, z)$ 为^[6]:

$$\varphi_0(\vec{R}, z) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \varphi_0(z) \quad (2)$$

$$\varphi_0(z) = \begin{cases} (\frac{b_0^3}{2})^{1/2} \cdot z \cdot \exp(-\frac{b_0 z}{2}) & z > 0 \\ [\frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 \epsilon_1 V_0} (\frac{1}{2} N_s + N_{\text{depl}})]^{1/2} \cdot \exp[(\frac{2mV_0}{\hbar^2})^{1/2} \cdot z], & z < 0 \end{cases} \quad (3)$$

其中 $\vec{R}$ 为 x - y 平面的二维矢量, $\frac{1}{\sqrt{A}}$ 为归一化常数. N_s 为 2DEG 浓度, ϵ_1 为 GaAs 的相对介电常数, N_{depl} 为 GaAs 沟道在界面附近的固定耗尽电荷浓度, V_0 为势垒高度, $V_0 = 0.3\text{eV}$.

$$b_0 = [\frac{12me^2}{\epsilon_0 \epsilon_1 \hbar^2} (N_{\text{depl}} + \frac{11}{32} N_s)]^{1/3} \quad (5)$$

$$N_{\text{depl}} \approx (\frac{2\epsilon_0 \epsilon_1 E_g N_a}{e^2})^{1/2} \quad (6)$$

其中 E_g 为 GaAs 的禁带宽度, N_a 为本底受主浓度.

本文只考虑带内散射(I—VII). 计算中, 温度小于 60K 时, 采用简并电子统计, 总的电子动量弛豫时间可由下式求出:

$$\frac{1}{\tau_{\text{total}}} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (7)$$

$T > 60\text{K}$ 时, 简并统计不再适用, 但这时 2DEG 电子迁移率主要由极性散射决定, 因此我们用 Fermi-Dirac 统计单独考虑极性光学声子散射.

2.1 声子散射

最主要的声子散射过程有^[7]: (I) 声学形变势散射; (II) 声学压电势散射; (III) 极性光学声子散射. 对于 (I)、(II), 电子动量弛豫时间分别为:

$$\frac{1}{\tau_{\text{de}}} = \frac{3\pi m D^2 K_B T b_0}{16 \hbar^3 C_1} \quad (8)$$

$$\frac{1}{\tau_{\text{pi}}} = \frac{e^2 K_B T b_0 m P^2}{2\pi \epsilon_0 \epsilon_1 \hbar^3 k_F^2} \int_0^\infty \frac{d(\frac{q_z}{b_0})}{[1 + (\frac{q_z}{b_0})^2]^3} \cdot [1 - \frac{\frac{q_z}{b_0}}{2 \sqrt{(\frac{2k_F}{b_0})^2 + (\frac{q_z}{b_0})^2}}] \quad (9)$$

其中 D 是形变势常数, P 是压电系数, C_1 是纵弹性常数. 它们的数值分别为:

$D = 7\text{eV}$, $C_1 = 13.97 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$, $P = 0.064$, $q_z = k_z - k'_z$, k_z 为 z 方向的波矢.

本文中 (III) 用体 GaAs 中极性光学声子散射^[7]来近似.

2.2 电离杂质散射

本文只考虑远程电离杂质(N_r)和 GaAs 中的本底电离杂质(N_b). 远程电离杂质和本底

电离杂质决定的电子动量弛豫时间由[4]给出.

2.3 合金散射

调制掺杂 GaAs/AlGaAs 异质结中有一部分电子将穿透到势垒层 AlGaAs 中,它们将受到合金无序引起的附加势的散射,电子动量弛豫时间由^[8,9]给出.

2.4 界面粗糙散射

设 Δ 为界面粗糙高度的均方差, λ 为界面粗糙的横向空间衰减率(关联长度), K_F 为 Fermi 波矢.界面粗糙散射决定的电子动量弛豫时间 τ_{ir} ^[10]为:

$$\frac{1}{\tau_{ir}} = \frac{64m(\Delta\lambda)^2\pi^2e^4}{\epsilon_0\epsilon_1\hbar^3} \left(\frac{1}{2}N_s + N_{depl}\right)^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^6\theta \exp(-k_F^2\lambda^2\sin^2\theta)}{(\sin^2\theta + \frac{2.616b_0}{4\pi k_F^2})^2} d\theta \quad (10)$$

3 GaAs/AlGaAs 2DEG 的迁移率特性和讨论

图 1 为 GaAs/AlGaAs 2DEG 电子迁移率与温度的关系曲线, $\circ$ 是我们的实验数据, μ_{total} 是我们理论计算值, μ_{de} , μ_{pi} , μ_{ap} , μ_{re} , μ_{ba} , μ_{al} , μ_{ir} 分别对应于:声学形变势、声学压电势、极性光学声子、远程电离杂质、本底电离杂质、合金无序、界面粗糙等散射机制.理论计算中用的参数如下(d 为隔离层厚度): $N_b = 2.1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$, $N_s = 3.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, $\Delta = 3 \text{\AA}$, $\lambda = 6 \text{\AA}$, $N_{depl} = 5 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$, $d = 250 \text{\AA}$.由图 1 可知,高温时,极性光学声子是最主要的散射机制;低温下,电子迁移率主要由本底电离杂质、远程电离杂质和压电势声子散射决定.

图 2 为隔离层厚度 $d = 250 \text{\AA}$ 的 GaAs/AlGaAs 2DEG 电子迁移率与本底电离杂质浓度 N_b 的理论关系曲线.计算中用的参数如下: $T = 4.8 \text{K}$, $\Delta = 3 \text{\AA}$, $\lambda = 6 \text{\AA}$, $N_s = 3.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, $N_{depl} = 5 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$.由图 2 可知,当 GaAs 中本底电离杂质浓度 $N_b = 1 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$ 时,

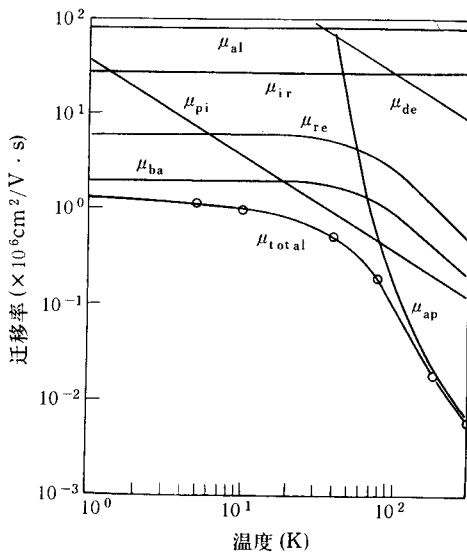


图 1 GaAs/AlGaAs 2DEG 电子迁移率与温度的关系

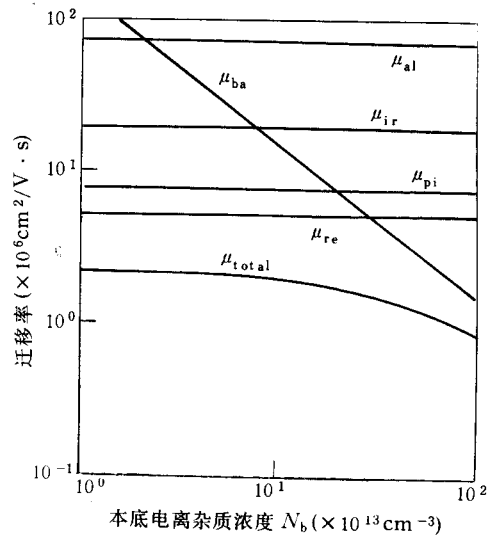


图 2

计算得出的 2DEG 的电子迁移率可达 $2.2 \times 10^6 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$; 而当 $N_b = 1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ 时, 2DEG 电子迁移率只有 $8 \times 10^5 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ 左右, 所以, 要制备高电子迁移率 GaAs/AlGaAs 2DEG 材料, 首先必须提高 GaAs 的纯度.

图 3 为 $d = 250 \text{\AA}$, $\Delta = 3 \text{\AA}$, $\lambda = 8 \text{\AA}$, $N_b = 2.1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$, $N_{\text{depl}} = 5 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$, $T = 4.8 \text{K}$ 时, GaAs/AlGaAs 2DEG 电子迁移率与 2DEG 浓度的关系. 由图 3 可知, 在 $1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2} < N_s < 6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 范围内, 本底电离杂质和远程电离杂质是最主要的散射过程; 电子迁移率随 N_s 增大而增大, 而当 $N_s > 6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 时, 界面粗糙散射成为最主要的散射机制, 这时电子迁移率随 N_s 进一步增大而减小. 2DEG 电子迁移率随浓度的变化特性可解释如下: 随着 N_s 增加, 穿透到 AlGaAs 层中的电子数目增加, 界面附近电子浓度也迅速增加, 所以合金无序散射和界面粗糙散射迅速增强, 从而导致电子迁移率随 N_s 增加而下降.

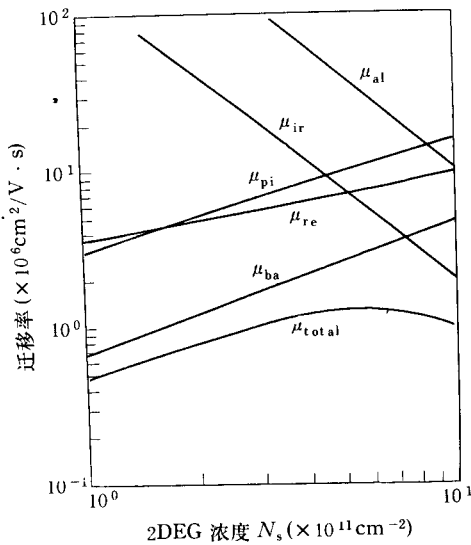


图 3

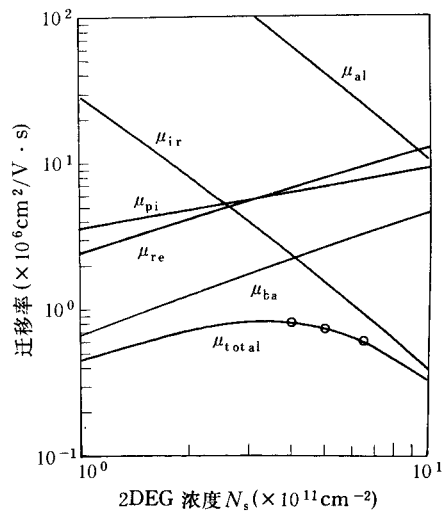


图 4

图 4 为 $d = 250 \text{\AA}$, $\Delta = 5 \text{\AA}$, $\lambda = 11 \text{\AA}$, $N_b = 2.1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$, $N_{\text{depl}} = 5 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$, $T = 6.3 \text{K}$ 时, GaAs/AlGaAs 2DEG 电子迁移率与浓度的关系的理论曲线, $\circ$ 是我们样品 B084C 的实验数据. 图 4 给出了界面粗糙度较大时, 2DEG 电子迁移率与浓度的关系的理论曲线, 同时也给出了我们有 MBE 制备的样品 B084C 的实验结果. 模拟曲线与实验结果符合很好. 由图 4 可知, 当 $N_s = 3.3 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 时, 电子迁移率达到最大值, $\mu_{\text{max}} \approx 8.25 \times 10^5 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$, $N_s > 3.3 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 时, 2DEG 电子迁移率迅速下降. 由此可见, 界面粗糙对 2DEG 电子迁移率影响很大, 要获得高电子迁移率 GaAs/AlGaAs 2DEG 异质结材料, 必须做出界面起伏只有单分子层的 GaAs/AlGaAs 界面.

4 结论

本文计算结果表明: 当 $N_s > 6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 时, 界面粗糙散射成为最主要的散射机制, 因此做出原子级平整的 GaAs/AlGaAs 界面和高质量 AlGaAs 外延材料, 选择合适的 2DEG

浓度是制备高电子迁移率 GaAs/AlGaAs 2DEG 异质结材料所必须的. 本文的计算结果将对制备高电子迁移率 GaAs/AlGaAs 2DEG 异质结材料和 HEMT 材料有重要的指导意义.

参 考 文 献

- [1] P. K. Basu and B. R. Nag, Phys. Rev. ,1980,**B22**:4849.
- [2] P. J. Price, Ann. Phys. (USA), 1981,**133**:217.
- [3] P. J. Price, Surf. Sci. ,1982,**113**:199.
- [4] T. Ando, J. Phys, Society of Japan, 1982 ,**51**:3900.
- [5] W. Walukiewicz, H. E. Ruda, J. Lagowski and H. C. Gatos, Phys. Rev. ,1984,**B30**:4571.
- [6] L. Wendler, R. Haupt and V. G. Grigoryan, Physica, 1990,**B167**:101.
- [7] D. L. Rode, in Semiconductors and Semimetals, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer. Vol. 10, Chap. 1.
- [8] G. Bastard, Appl. Phys. Lett. ,1983,**43**:591.
- [9] P. K. Basu and B. R. Nag, Appl. Phys. . Lett. ,1983,**43**:689.
- [10] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, Rev. Mod. Phys. ,1982,**54**:437.

Study on Scattering Mechanism of GaAs/AlGaAs Two-Dimensional Electron Gas (2DEG)

Yang Bin, Cheng Yonghai, Wang Zhanguo, Liang Jiben, Liao Qiwei and Lin Lanying

(Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences,

Semiconductor Materials Science Laboratory, Beijing 100083)

Received 5 February 1994, revised manuscript received 9 May 1994

Abstract Adopting triangular quantum well approximation, we consider the main seven scattering mechanisms in GaAs/AlGaAs 2DEG system and calculate the electron mobility dependence on temperature, 2DEG density, background ionized impurity concentration and interface roughness when only the ground subband is occupied. The seven scattering processes are, polar optical, deformation potential, piezoelectric acoustic, remote ionized impurity, background ionized impurity, alloy disorder and interface roughness. The calculated results are in very good agreement with our experimental data. To our knowledge, this is the first report on the study of 2DEG electron mobility considering the seven scattering mechanisms mentioned above.

PACC: 7210