

高电子迁移率 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 二维电子气 (2DEG) 异质结结构参数优化研究*

杨 斌 王占国 陈涌海 梁基本 廖奇为 林兰英
朱战萍 徐 波 李 伟

(中国科学院半导体所半导体材料科学研究实验室 北京 100083)

摘要 本文采用三角阱近似,考虑了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 二维电子气(2DEG)异质结中七种主要的散射机制,计算了 2DEG 电子迁移率与隔离层厚度(d)和 Al 组分(x)的关系,对 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 异质结的结构参数进行了优化分析,就作者所知,本文首次计算了 2DEG 电子迁移率与 Al 组分 x 的关系,得到了与实验规律一致的结果.

PACC: 7200, 7210, 7280E, 6114F

1 引言

高电子迁移率 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 二维电子气(2DEG)异质结材料的基础物理研究和新型器件研制方面都有十分重要的应用^[1,2]. 2DEG 电子迁移率与隔离层厚度(d)和 Al 组分(x)密切相关. W. Walukiewicz^[3]等人对 2DEG 迁移率与隔离层厚度的关系只做了简单的讨论;T. Ando^[4]计算了 2DEG 浓度与 Al 组分 x 的关系,但他的结果与实验规律不符. 到目前为止,还没有看到计算 2DEG 电子迁移率与 Al 组分关系的工作. 本文计算了 2DEG 电子迁移率与隔离层厚度(d)和 Al 组分(x)的关系,对 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 异质结结构参数进行了优化分析,得到了与实验一致的结果.

2 理论计算

图 1 是 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 异质结的能带结构示意图. GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 异质结的势垒高度 V_b 与 Al 组分 x 有关,

$$V_b = \Delta E_c = 997.6x \text{ (meV)} \quad (1)$$

* 国家自然科学基金资助项目

杨 斌 男,1966 年生,博士生,从事半导体低维结构材料与器件方面的研究工作

陈涌海 男,1967 年生,实习研究员,从事 GaAs 材料与器件关系研究

1994 年 4 月 5 日收到初稿,1994 年 8 月 19 日收到修改稿

设 N_s 为 2DEG 浓度, ϵ_2 为 Al_xGa_{1-x}As 的相对介电常数, N_{depl} 为 GaAs 层中的固定耗尽电荷浓度^[4], N_r 为电离施主浓度, ϵ_1 为 GaAs 的相对介电常数, N_A 为 GaAs 的本底受主浓度, E_g 为 GaAs 的禁带宽度, V_{sp} 为隔离层两端的电势能之差, V_1 为掺杂 Al_xGa_{1-x}As 层中厚度为 d_1 ($d_1=L-d$) 的空间电荷层两端的电势能之差,

$$V_{\text{sp}} = \frac{e^2 d (N_{\text{depl}} + N_s)}{\epsilon_0 \epsilon_2} \quad (2)$$

$$V_1 = \frac{e^2 (N_s + N_{\text{depl}})^2}{2 \epsilon_0 \epsilon_2 N_r} \quad (3)$$

在平衡时, 异质结界面两边的 Fermi 能级相同, 即

$$V_b = E_0 + \frac{\pi \hbar^2}{m} N_s + E_D + V_1 + V_{\text{sp}} \quad (4)$$

其中 E_0 为 2DEG 基态能级^[5], E_F 为 Fermi 能级, m 为电子有效质量, $m=0.067m_0$, E_D 为掺杂 Al_xGa_{1-x}As 中的施主束缚能. 由 E. F. Schubert 和 K. Ploog^[6,7]等人的实验结果可知, E_D 与 Al 组分 x 有关, E_D 分别为: 6meV ($x \leq 0.2$), 50meV ($x=0.3$), 100meV ($x=0.35$), 140meV ($x=0.4$).

将 (1), (2), (3) 和 E_0 ^[5] 代入 (4) 中, 就可得到 x, d, N_s, N_r 之间的关系式, 进而求出 2DEG 电子迁移率^[8] μ 与 d, μ 与 x 之间的关系. GaAs/AlGaAs 2DEG 异质结中, 当电子只占据基态子带时, 主要有以下七种散射机制: (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. 本文计算中考虑了上述七种散射机制, 在低温下, 采用简并电子统计, 总的电子迁移率由下式求出:

$$\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \quad (5)$$

其中 μ_i 为上述七种散射机制分别对应的 2DEG 电子迁移率, 详细的计算 2DEG 迁移率的方法将在文献[8]中报道. 本文计算中为了消除各种因素相互影响, 将 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 界面粗糙度设为定值, 取 $\Delta=3\text{\AA}$, $\lambda=6\text{\AA}$.

3 结果与讨论

3.1 隔离层厚度 d 与 2DEG 浓度 N_s 和电子迁移率 μ 的关系

图 2 为 2DEG 浓度 N_s 与隔离层厚度 d 的理论计算曲线. 图 2 计算中取 $N_b=2.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$, $N_D=5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $T=5\text{K}$. 由图 2 可知, 随着隔离层厚度增加, 2DEG 浓度减小, 对于相同的隔离层厚度, N_s 的大小与 Al 组分 x 有关. $x=0.4$ 时, N_s 最小; $x=0.3-0.35$ 时, 对应的 2DEG 浓度较高, 因此, 要得到高浓度 2DEG 时, 应选择 $x=0.3-0.35$. 这个结果与实验规律是一致的.

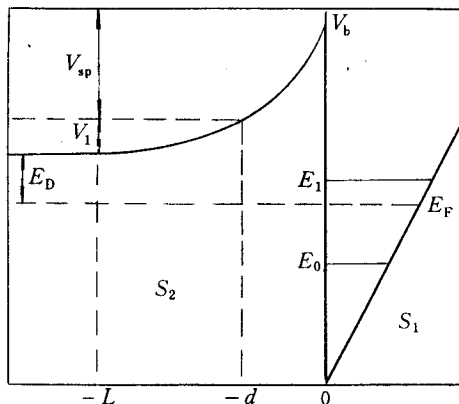


图 1 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 异质结的能带结构示意图
其中 S_1 为 GaAs, S_2 为 Al_xGa_{1-x}As

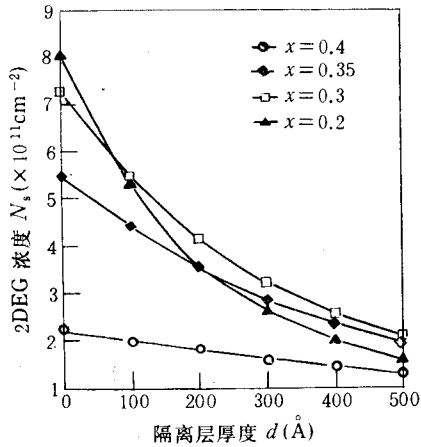


图2 对不同 Al 组分 x , 2DEG 浓度 N_s 与隔离层厚度 d 的理论计算曲线

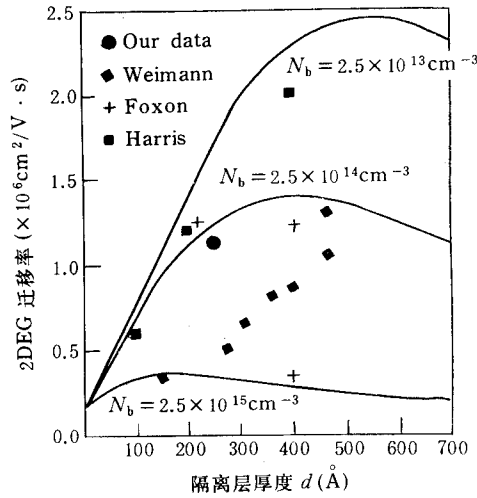


图3 2DEG 电子迁移与隔离层厚度关系的理论计算曲线

图3是2DEG电子迁移率与隔离层厚度关系的理论计算曲线,在图3中同时也给出了Harris等人的实验结果^[9]和我们的实验结果.计算中取 $N_D = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $T = 5 \text{K}$.显然,2DEG电子迁移率与隔离层厚度密切相关.这是因为一方面,当隔离层厚度从零开始逐渐增大时,远程电离杂质对2DEG电子的散射作用逐渐减小,电子迁移率逐渐增大;另一方面,隔离层厚度的增大导致2DEG浓度减小,使2DEG对本底电离杂质和远程电离杂质散射的屏蔽作用减小;当隔离层厚度增大到这两种因素的作用相等时,迁移率达到最大值;隔离层厚度再增加时,将使2DEG电子迁移率减小.同时,本底电离杂质浓度 N_b 的大小对2DEG迁移率也有很大影响.如果 $N_b = 2.5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$,则 $d = 180 \text{\AA}$ 时迁移率最大,只有 3.75×10^5

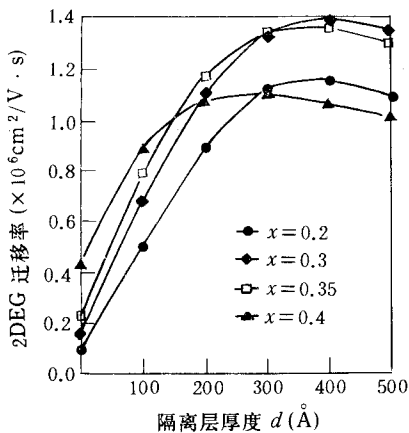


图4 对不同 Al 组分, 2DEG 电子迁移率与隔离层厚度的关系

$\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$;而 $N_b = 2.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$ 时, $d = 600 \text{\AA}$ 时迁移率最大,可达 $2.43 \times 10^6 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$;图3的计算结果表明:当本底电离杂质浓度较高时,应选择较小的隔离层厚度,而当本底电离杂质浓度较小时,应选择较大的隔离层厚度.

3.2 2DEG 电子迁移率与 Al 组分 x 的关系

图4为对不同 Al 组分,2DEG电子迁移率与隔离层厚度的关系.图4计算中取 $T = 5 \text{K}$, $N_D = 5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $N_b = 2.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$.由图4可知,当 $x = 0.3 - 0.35$ 时,2DEG迁移率较高. $x = 0.2$ 或 $x = 0.4$ 时,2DEG迁移率较小.这是因为:当 $x = 0.2$ 时,对应的势垒高度较小($V_b \approx 200 \text{meV}$),合金散射和界面粗糙散射较强^[8];且当隔离层厚度较大时 N_s 很小(图2),电离杂质散射较强,因此

2DEG 电子迁移率较小. 当 $x=0.4$ 时, N_s 很小(图 2), 电离杂质散射很强, 因此对应的 2DEG 电子迁移率也较小. $x=0.3-0.35$ 对应的势垒高度和 2DEG 浓度都较大, 所以电子迁移率较高.

H. L. Stormer 等人^[10]制备了一组 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 异质结材料, Al 组分 x 分别为 0.15, 0.2 和 0.3, 他们的实验结果表明: 迁移率随 x 增大而增大, $x=0.3$ 对应的 2DEG 电子迁移率最高. L. Pfeiffer^[11]等人用 δ 掺杂方法制备的 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 异质结材料在 $T=0.35\text{K}$, $d=700\text{\AA}$, $x=0.35$ 时, 得到了迄今为止报道的最高的 2DEG 电子迁移率, $\mu=1.17\times 10^7\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, 这些实验结果与我们的理论计算正好吻合.

4 结论

本文考虑了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 中主要的七种散射机制, 计算了 2DEG 电子迁移率与隔离层厚度 d 、Al 组分 x 的关系, 结果表明, 制备高电子迁移率 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 2DEG 异质结材料, 应选择 Al 组分 $x=0.3-0.35$, 隔离层厚度 d 要根据本底电离杂质浓度 N_b 来确定.

参 考 文 献

- [1] D. C. Tsui and H. L. Stormer, IEEE J. Quantum Electron., 1989, **QE-22**:1711.
- [2] T. Minura, Surf. Sci., 1982, **113**:454.
- [3] W. Walukiewicz, H. E. Ruda, H. Lagowski and H. C. Gatos, Phys. Rev., 1984, **B30**:4571.
- [4] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn., 1982, **51**:3900.
- [5] T. Ando, A. B. Flower and F. Stern, Rev. Mod. Phys., 1982, **54**:437.
- [6] E. F. Schubert and K. Ploog, Phys. Rev., 1984, **30**:7021.
- [7] N. Chand, T. Herdson, J. Klem, W. T. Masselink and R. Fischer, Phys. Rev., 1984, **B30**:4481.
- [8] 杨 斌等, GaAs/Al_xGa_{1-x}As 二维电子气(2DEG)散射机理研究, 半导体学报, 1995, **16**(4):248-252.
- [9] J. J/Harris, C. J. Foxon, D. E. Lacklison and K. W. J. Barnham, Supperlattices and Microstructures, 1986, **2**:563.
- [10] H. L. Stormer, A. C. Gossard, W. Wiegmann and Baldwin, Appl. Phys. Lett., 1981, **39**:912.
- [11] L. Pfeiffer, K. W. West, H. L. Stormer and K. W. Baldwin, Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 1989, **45**:3.

Optimization of Structure Parameters of High Mobility GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Two Dimensional Electron Gas (2DEG) Heterostructure

Yang Bin, Wang Zhanguo, Cheng Yonghai, Liang Jiben, Liao Qiwei,
Lin Lanying, Zhu Zhanping, Xu Bo and Li Wei

*(Semiconductor Materials Science Laboratory, Institute of Semiconductors,
The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)*

Received 5 April 1994, revised manuscript received 19 August 1994

Abstract Adopting triangular quantum well approximation, we considered the main seven scattering mechanisms in GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ two-dimensional electron gas (2DEG) heterostructure and calculated the dependence of electron mobility on spacer width d and Al composition x , in the mean time, we optimized the structure parameters of GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 2DEG heterostructure. To the author's knowledge, this is the first report concerning with the calculated dependence of 2DEG mobility on Al composition which is in good agreement with experiments.

PACC: 7200, 7210, 7280E, 6114F