

Ge/Si 量子阱结构的 C-V 特性的模拟

程佩红 黄仕华[†]

(浙江师范大学物理系, 金华 321004)

摘要: 采用有限深对称方势阱近似模型求解薛定谔方程得到 Ge/Si 量子阱中的子能级分布, 并基于迭代法数值求解泊松方程模拟计算了量子阱结构样品在不同偏压下的载流子浓度分布和 C-V 特性. C-V 曲线上电容平台的存在是量子阱结构 C-V 特性的显著特征, 它与量子阱结构参数有密切的关系. 随着覆盖层厚度的减小, C-V 曲线上平台起始点的电容值增加, 并且向低电压方向移动直至其消失. 随着量子阱中的掺杂浓度提高, 阱中的载流子浓度也会相应增加, 那就需要更高的外加电压才能耗尽阱中的载流子, 因此平台宽度也就随着掺杂浓度的增加而增加. 当覆盖层厚度增加时, 由于电压的分压作用, 使得降在量子阱上的分压相应减少, 因此需要更大的外加偏压才能使阱中载流子浓度全部耗尽, 这就使平台的宽度增大. 同样地, 当覆盖层掺杂浓度增加时, 覆盖层中更多的载流子转移到阱内, 也就需要更高的外加偏压才能使阱中载流子全部耗尽, 平台的宽度也就随之增大.

关键词: Ge/Si 量子阱; C-V 特性法; 迭代法

PACC: 7280C; 7320D; 0260

中图分类号: TN304.1

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2008)01-0110-06

1 引言

半导体的电容-电压谱(C-V)因具有简单、快捷和非破坏性等特点, 被广泛应用于测定半导体材料的载流子浓度分布. C-V 测试法是在直流偏压 V 上迭加一个小的交变高频电压 v , 此时的势垒宽度会随之发生微小的变化 dW , 且势垒宽度 W 将随着反向直流偏压 V 增大而向半导体内部扩展, 此时 dW 中的载流子变化与平行板电容器中的充放电相类似, 其电容特性可表示为 $C = \epsilon A / V$, 其中 ϵ 是材料的介电常数, A 是结面积.

1980 年, Kroemer 等人^[1]首次提出利用 C-V 技术测定半导体异质结的能带偏移量和界面电荷密度. 对于异质结而言, 由于其界面处存在能带偏移, 这将引起载流子在界面附近重新进行分布, 在界面的一侧形成载流子的积累, 另一侧则为载流子耗尽. 当在异质结材料表面形成肖特基势垒后, 表面势垒区就会随外加反向偏压增加而扩展, 然后经过异质界面, 因此可用 C-V 法测得异质结两边的载流子浓度. 此时载流子浓度分布不仅与掺杂浓度有关, 而且与界面处的能带偏移以及界面电荷等因素密切相关. 随后, C-V 技术被用于研究量子阱半导体的载流子浓度分布^[2~6]. 1991 年, Letartre 等人^[7]应用解析法求解泊松方程, 模拟计算了结区中存在单量子阱时的 C-V 曲线, 并由此得出能带偏移量. 1996 年, 复旦大学的 Lu 等人^[8]模拟计算了量子阱的 C-V 曲线, Brounkov 等人^[9]通过联立薛定谔方程和泊松方程得到其数值自洽解, 模拟计算了具有一个单量子阱肖特基势垒异质结的 C-V 特性曲线, 并获得量子阱的子带能级位置和电子密度分布. 模拟计算研究结果都表明, 由于

量子阱对载流子的限制效应, 使其 C-V 特性发生明显变化, C-V 曲线上的平台电容数值及其宽度均随量子阱结构参数的变化而变化, 这与体结构材料及异质结构有着明显的差异.

本文从理论上对 Ge/Si 量子阱材料的 C-V 特性进行了研究, 通过有限深势阱近似求解薛定谔方程, 并基于迭代法数值求解泊松方程模拟计算了单量子阱结构样品在不同偏压下的载流子浓度分布和 C-V 特性, 继而讨论不同量子阱结构参数对 C-V 特性曲线的影响.

2 量子阱结构的 C-V 测试的基本原理

为了得到量子阱材料完整的 C-V 特性曲线, 测试样品应该是一系列量子阱和一个肖特基势垒, 其空间电荷区在零偏时并未扩展到量子阱中. 由于电荷在阱中和势垒区中不断地转移, 量子阱两侧将出现能带偏移现象. 这种包含 p 型 Si/Ge 单量子阱, 其价带结构可由求解泊松方程得到:

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d}{dz} \right) V(z) = -\rho(z) \quad (1)$$

对方程(1)积分两次, 并考虑边界条件, 可以得到:

$$V(0) - V(\infty) = - \int_0^{\infty} dz \left[\frac{1}{\epsilon} \int_z^{\infty} dz \rho(z) \right] \quad (2)$$

$V(0) - V(\infty)$ 等于肖特基势垒 V_D 和偏压 V 之和.

图 1 给出了反向电压为零时 Ge/Si 单量子阱的价带结构. 肖特基势垒的宽度定义为 $L_D(0)$, 量子阱两侧的耗尽区的宽度分别为 $L_2(0)$ 和 $L_3(0)$. 对于一个对称方量子阱, $L_2(0)$ 等于 $L_3(0)$. $L_D(0)$ 和 $L_2(0)$ 可以分别由方程(2)得到:

[†] 通信作者. Email: huangshihua@zjnu.cn

2007-06-25 收到

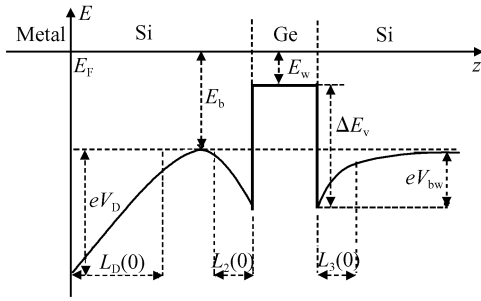


图 1 零偏时 Ge/Si 单量子阱的价带结构图

Fig.1 Valence band diagram of a Ge/Si single quantum well under zero bias voltage

$$L_D(0) = \left(\frac{2\epsilon_b V_D}{eN_{Ab}} \right)^{1/2}, L_2(0) = \left(\frac{2\epsilon_b V_{bw}}{eN_{Ab}} \right)^{1/2} \quad (3)$$

其中 e 是电子电量; N_{Ab} 和 ϵ_b 分别为势垒的掺杂浓度和介电常数; V_{bw} 是势垒和量子阱之间的耗尽电势, 可以由下式确定:

$$eV_{bw} = \Delta E_v + E_w - E_b \quad (4)$$

式中 ΔE_v 表示 Ge 和 Si 之间的价带偏移量; E_w 和 E_b 分别是量子阱区和势垒区价带顶能量与费米能级之差.

为了测量该结构的电容, 将一个频率为 f 的小交流电压 δv 叠加在直流偏压上. 由 δv 引起单位体积内电荷的变分 δQ 为

$$\delta Q = \int_0^\infty dz \delta \rho(z) \quad (5)$$

其中 电荷密度变分 $\delta \rho(z)$ 与 δv 之间的关系由下式决定:

$$\delta v = - \int_0^\infty dz \left[\frac{1}{\epsilon} \int_z^\infty dz \delta \rho(z) \right] \quad (6)$$

由此可以得到此结构的电容表达式:

$$C(V)^{-1} = \left| \frac{\delta v}{\delta Q} \right| = \int_0^\infty dz \left[\frac{1}{\epsilon} \int_z^\infty dz \delta \rho(z) \right] / \int_0^\infty dz \delta \rho(z) \quad (7)$$

当频率较低时, 电荷密度的变分可以跟随交流偏压的变化而变化, 此时 $C(V)$ 将不依赖于频率 f , 而是等于静态表面电荷密度与偏压之间的变化率, 即

$$C(V)^{-1} = \frac{dV}{dQ_s} \quad (8)$$

3 单量子阱结构的数值模拟

单量子阱结构样品的 C-V 特性的模拟计算, p 型半导体表面形成肖特基势垒后, 平衡时满足一维泊松方程, 可将方程(1)改写为:

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon \frac{d}{dz} \right) V(z) = -e [P(z) - N_A^-(z)] \quad (9)$$

式中 ϵ 为介电常数; e 为电子电量; N_A^- 为电离的杂质浓度分布; $P(z)$ 为载流子的浓度分布, 若已知样品中 N_A^- 及 $P(z)$ 分布, 就可能通过求解该常微分方程来求得样品中的静电势 $V(z)$ 及电场 $E(z)$ 的分布. 其中电场 $E(z)$ 可表示为:

$$E(z) = \frac{dV(z)}{dz} \quad (10)$$

3.1 各区域载流子及电离杂质的浓度分布

样品中的载流子浓度及电离杂质浓度在势垒区和势阱区不尽相同, 因此需分区域讨论分析. 对势垒区来说, 由于在常规测试温度范围内 ($77 \sim 300K$) 杂质全部电离, 因此势垒区的电离杂质浓度 N_{Ab}^- 就等于掺杂浓度 N_{Ab} . 对于势阱区, 由于费米能级位于阱底附近, 那么电离杂质浓度与费米能级 E_F 密切相关, 那么势阱区的电离杂质浓度 N_{Aw}^- 就可表示为^[15]

$$N_{Aw}^- = \frac{N_{Aw}}{1 + 2\exp((E_{vw} + \Delta E_A - E_F)/kT)} \quad (11)$$

式中 ΔE_A 为受主杂质的电离能; E_{vw} 为量子阱中价带顶的能量.

对于势垒区的载流子浓度计算采用体材料的三维计算公式^[10]:

$$P_{3D} = N_{vb} \exp(-(E_F - E_{vb})/kT) \quad (12)$$

其中 $N_{vb} = 2 \frac{(2\pi m_{pb}^* k_0 T)^{3/2}}{h^3}$ 为势垒区价带顶有效态密度.

对于势阱区的载流子浓度计算采用二维计算公式^[11]:

$$P_{2D} = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2 L_w} \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} i \int_{E_i}^{E_{i+1}} f(E) dE + n \int_{E_n}^{E_{vb}} f(E) dE \right\} \quad (13)$$

其中 m^* 为阱中二维空穴有效质量; E_i 是阱中第 i 个子能级的位置; E_{vb} 为势垒区的价带顶能量; $f(E)$ 为费米分布函数 $f(E) = 1 / \{1 + \exp[(E_F - E)/kT]\}$, 该式中的积分可表示为:

$$\int_{E_i}^{E_{i+1}} f(E) dE = h(E_{i+1}) - h(E_i) \quad (14)$$

其中 $h(E_i) = kT [\ln(1 + \exp(u)) - u]$, $u = (E_F - E_i)/kT$, 则方程(12)可写成

$$P_{2D} = \left(\frac{m^* kT}{\pi \hbar^2 L_w} \right) \left[nh(E_{vb}) - \sum_{i=1}^n h(E_i) \right] \quad (15)$$

3.2 量子阱中的子能级位置计算

关于量子阱中的子能级计算, 可采用有限深对称方势阱近似模型求解薛定谔方程得到. 量子阱结构的 Ge 中空穴处于价带量子阱中, 在与结平行的面内形成二维空穴. 同时, 当空穴的能量低于 ΔE_v 时, 在价带量子阱中形成空穴的束缚态能级. 在计算价带量子阱中空穴束缚态能级时, 虽然价带顶能级位于布里渊区中心 $k = 0$ 处, 但价带顶的空穴态是简并的, 有轻、重空穴二支带; 在量子阱中的轻、重空穴的简并消除了, 由于轻、重空穴态密度有效质量不同, 它们所受的量子尺寸效应不同, 因而量子化束缚态能级分裂的程度不同, 重空穴束缚态能级分布较密, 而轻空穴束缚态能级分布较稀. 因此, 需分别计算由重空穴和轻空穴所形成的两套子能级, 然后由(14)式分别计算出这两套能级上的载流子浓度, 其和即为阱中的载流子浓度.

3.3 数值迭代求解泊松方程

由上述各区域载流子及电离杂质浓度分布可知,在 z 轴方向上,泊松方程右侧各项都随着位置 z 而变化,因此必须采用数值求解的方法来得到静电势 $\phi(z)$ 与电场 $E(z)$ 的分布.求解过程采用迭代法,即先假设一个表面势电压 V_s 和表面电场 E_{surf} ,此势电压应体现肖特基势垒高度 V_D 及样品两侧所加的反向偏压 V_{rev} ,即

$$V_s = V_D + V_{\text{rev}}. \quad (16)$$

那么我们可通过求解泊松方程(9)得到覆盖层的静电势及电场分布,并可得到该层边界处的静电势电压 V_c 及电场 E_c ,根据边界连续性条件

$$\begin{cases} V_c = V_{w0} \\ \epsilon_b E_c = \epsilon_w E_{w0} \end{cases} \quad (17)$$

即可得到量子阱左边界处的静电势 V_{w0} 及电场 E_{w0} .

根据量子阱区域的初始条件,即可通过求解泊松方程(9)得到阱中的静电势及电场分布,并可得到阱区右边界处的静电势 V_w 及电场 E_w 值,根据边界连续性条件

$$\begin{cases} V_w = V_{b0} \\ \epsilon_w E_w = \epsilon_b E_{b0} \end{cases} \quad (18)$$

即可得到缓冲层势垒区左边界处的静电势 V_{b0} 及电场 E_{b0} .

根据缓冲层初始条件求解泊松方程(9)即可知该区域静电势及电场分布,及缓冲层势垒区右边界 L_b 处的静电势 V_b 及电场 E_b .根据边界条件, L_b 处的静电势 V_b 与电场 E_b 应同时为 0.若经上述计算步骤得到的 V_b 与 E_b 不同时为 0,那么就需要修正初值条件,也就是改变表面电场 E_{surf} 的值,重新进行上述计算,如此反复迭代直到 V_b 与 E_b 同时为 0.迭代过程终止后,即可得到表面势电压为 V_s 时的电势分布 $V(z)$,并可由此得出样品的价带结构.若对不同的表面势电压 V_s 或反向偏压 V_{rev} 重复进行上述计算,就可得到不同反向偏压下的能带分布图.

3.4 C-V 及 $N_{C,V}-W$ 特性谱

由上述讨论可知,对于一个给定的反向偏压 V_{rev} ,可通过数值迭代求解泊松方程,得到量子阱结构的静电势 $V(z)$ 和电场 $E(z)$ 分布,以及与 V_{rev} 相对应的表面电场 E_{surf} ,由高斯定律可知,单位面积内所包含的存储电荷 Q 与样品表面电场成正比,

$$Q = \epsilon E_{\text{surf}}, E_{\text{surf}} = - \left. \frac{dV(z)}{dz} \right|_{\text{surface}} \quad (19)$$

对一组不同的反向偏压 V_{rev} ,都计算出相应的电荷密度 Q ,那么我们就可以得到一条 $Q-V_{\text{rev}}$ 的关系曲线,对该曲线的每一点利用“准静态逼近”计算 SQW 结构每单位面积的电容 C ,

$$C = \left. \frac{\Delta Q}{\Delta V} \right|_{V_{\text{rev}}} \quad (20)$$

式中 ΔQ 表示反向偏压在指定点 V_{rev} 附近变化 ΔV 时总电荷的变化量.由 $C-V$ 关系曲线,并采用耗尽近似可

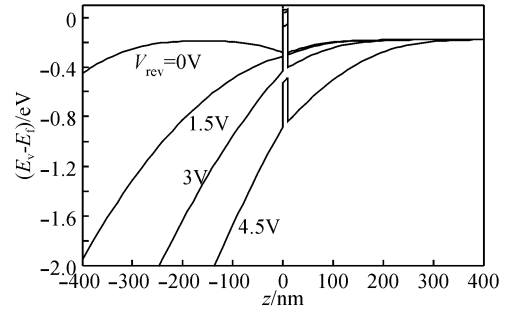


图 2 Ge/Si 单量子阱的价带结构随外加偏压的变化
Fig.2 Valence band diagram and the change law of Ge/Si single quantum well followed with the applied voltage

以计算表观浓度分布图 ($N_{C,V}-W$),

$$N_{C,V}(W) = \frac{C^3}{q\epsilon\epsilon_0(dC/dV)}, \quad W = A \frac{\epsilon\epsilon_0}{C} \quad (21)$$

式中 W 是深度; ϵ 是介电常数; q 是电子电荷量; A 是肖特基势垒面积.

4 结果与讨论

模拟计算过程中采用的基本参数有^[10]:量子阱中重空穴有效质量 $m_H^* = 0.30m_0$, m_0 为电子的质量,轻空穴有效质量 $m_L^* = 0.044m_0$,受主杂质的电离能 $\Delta E_A = 0.01\text{eV}$,硅与锗材料中的空穴状态密度有效质量分别为 $m_{pb}^* = 0.56m_0$ 与 $m_{pw}^* = 0.31m_0$,介电常数分别为 $\epsilon_b = 11.9$ 与 $\epsilon_w = 16.0$,量子阱两侧异质界面处的价带偏移量 $\Delta E_v = 0.35\text{eV}$,肖特基势垒高度 $V_D = 0.27\text{V}$,温度 $T = 300\text{K}$.图 2 给出了不同偏压下单量子阱的价带分布图,在此模拟中所采用材料的结构参数如表 1 所示.

根据上述结构参数模拟得到 Si/Ge/Si 单量子阱材料的 $C-V$ 曲线如图 3 所示,从图中可以看出,当反向偏

表 1 单量子阱材料的结构参数

Table 1 Structure parameters of single quantum well

覆盖层厚度 L_c	势垒层掺杂浓度 N_{Ab}	量子阱宽 L_w	量子阱掺杂浓度 N_{Aw}
400nm	$1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	10nm	$4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

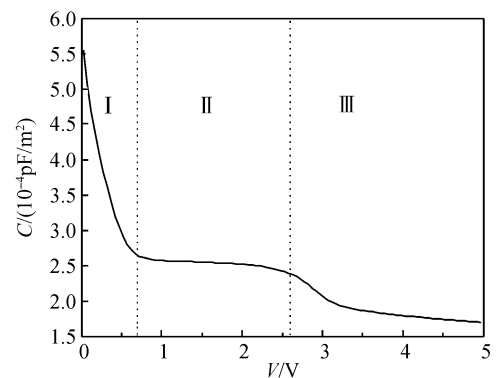


图 3 Ge/Si 单量子阱的 $C-V$ 模拟曲线

Fig.3 Simulation $C-V$ characteristics profiles of Ge/Si single quantum well

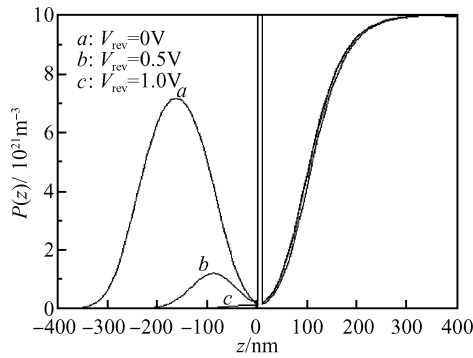


图 4 Ge/Si 单量子阱在不同反向偏压(0~1.0V)下模拟的载流子浓度分布

Fig.4 Carrier concentration profiles of Ge/Si single quantum well in different bias voltage (0~1.0V)

压为 0.7~2.6V 时,电容值变化很小,出现一个较为显著的平台.为了方便起见,此 C-V 曲线将被分为三个区域来讨论.

在区域 I 的电压范围内,样品表面金属半导体接触形成肖特基势垒,量子阱两侧载流子将向阱内转移,在阱中形成载流子积累,阱外则形成耗尽区.此时载流子浓度分布 $P(z)$ 随外加偏压变化如图 4 所示,当外加偏压增大时,覆盖层中的载流子将不断地向量子阱中转移,样品表面的耗尽区将随着偏压的增加而向内部扩展,直至量子阱的边缘.由图 4 中曲线 c 可知,即当外加偏压 $V_{rev} = 1.0V$,覆盖层中的载流子已基本耗尽,在整个耗尽区边缘附近,夹有一层载流子浓度很高的量子阱.

此区域内外加电压的变化主要引起覆盖层中的肖特基势垒的变化,此时的电容也就由该势垒电容所决定,并随电压的增加而减小.当肖特基势垒扩展到量子阱附近时,即与量子阱产生的势垒重叠时,由于该区域的载流子已转移到阱内,使电容随电压的变化更为迅速,直至肖特基势垒扩展到量子阱的边缘,此时覆盖层中的载流子已经全部转移到量子阱中.若覆盖层厚度 L_c 较小或者其掺杂浓度 N_{Ab} 比较低以至于反向偏压为零时,肖特基势垒就已经扩展到量子阱边缘或与量子阱重叠了,那么 C-V 曲线就直接从区域 II 开始.

在区域 II 的电压范围内,外加电压的变化将使量子阱的能带发生变化,并使阱中的载流子浓度也随之变化,此时样品中的载流子浓度分布 $P(z)$ 随外加偏压变化如图 5 所示.当反向偏压增大时,耗尽区边缘处载流子耗尽较少,即耗尽区向半导体一侧扩展较小,这与图 3 的 C-V 曲线在一定电压范围内电容变化很少相一致.此时交变电压 dV 所引起的电荷变化 dQ 主要是来自于阱中的载流子浓度的变化,样品电容就相当于由量子阱与样品表面的金属层所构成的平行板电容器,其电容值的大小主要由覆盖层的厚度所决定,因此在此区域内的电容值变化很小,C-V 曲线几乎呈现一个平台.

在区域 III 中,随着反向偏压的进一步增加,阱中载流子的浓度不断减少直至全部耗尽,如图 5 中的曲线 f 和图 6 中的曲线 g 所示,此时耗尽区也开始向量子阱的

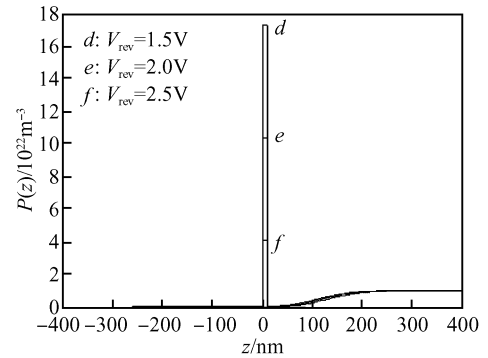


图 5 Ge/Si 单量子阱在不同反向偏压(1.5~2.5V)下模拟的载流子浓度分布

Fig.5 Carrier concentration profiles of Ge/Si single quantum well in different bias voltage (1.5~2.5V)

另一侧硅材料缓冲层扩展,直至耗尽区内不再有载流子,如图 6 中的曲线 h 和 i 所示,此时 C-V 特性与体材料一致,即由该区域中的掺杂浓度所决定.

由上述分析可知,图 3 的 C-V 特性中,电容缓变区域是反映位于耗尽区中一薄层量子阱中载流子的纵向耗尽过程,因此用常规的 C-V 分布法能观察到被限制于量子阱内的载流子浓度的积累.但阱中载流子并不是横向逐层耗尽,因此在量子阱处由方程(21)得到的 C-V 表观载流子浓度分布 $N_{Cv}-W$ 与实际的载流子浓度分布有一定的差别,它并不代表载流子深度的真实分布,但可反应出载流子的积累,从该曲线上还是能获得量子阱结构的有关信息.首先,该曲线的峰值出现是与 C-V 曲线上的平台有关,因在平台范围内,电容随电压变化很小,其斜率 dC/dV 就很小,而 $N_{Cv}-W$ 是与 dC/dV 成反比,因此 C-V 曲线上平台与图 7 中的曲线峰值相对应,即该峰值与量子阱中的载流子的积累有关,当阱中载流子浓度越高时,平台的电压范围也就越大,平台的坡度也就越小, dC/dV 也就相应减小,这就使 $N_{Cv}-W$ 曲线的峰值增大.因此,可以认为该峰值的大小与阱中的载流子浓度的多少有关,此外 $N_{Cv}-W$ 曲线上的峰位与量子阱的位置相接近.

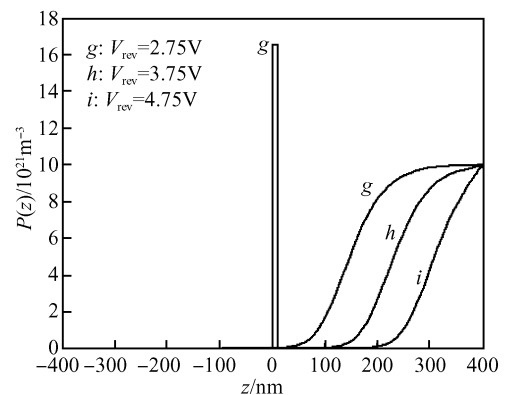


图 6 Ge/Si 单量子阱在不同反向偏压(2.75~4.75V)下模拟的载流子浓度分布

Fig.6 Carrier concentration profiles of Ge/Si single quantum well in different bias voltage (2.75~4.75V)

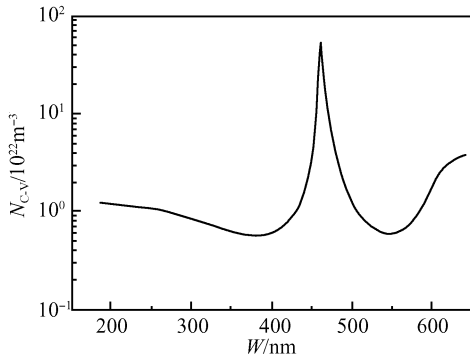


图 7 由图 3 的 C-V 曲线得到表观载流子浓度曲线

Fig.7 Apparent carrier concentration profiles derived by Fig. 3

C-V 曲线上平台存在是量子阱结构 C-V 特性的显著特征,它与量子阱结构参数有密切的关系.图 8 显示了不同覆盖层厚度的 C-V 曲线,从图中我们可以看出,随着覆盖层厚度的减小,C-V 曲线上第一拐点即平台起始点的电容值也增加,并且向低电压方向移动直至其消失.这是因为加反向偏压后阱外载流子将向阱内转移,在量子阱附近形成耗尽区.而样品表面金属与半导体相接触产生的肖特基势垒也形成耗尽区.C-V 曲线的第一个拐点就是对应着两个耗尽区相互重叠后,随着外加偏压的增加,覆盖层中载流子全部耗尽.在此之后,交变电压 dV 所引起的电荷变化 dQ ,不再由覆盖层中载流子变化而产生,而是由阱中载流子的变化所决定的.

图 9 显示了覆盖层厚度为 300nm,改变势垒层中掺杂浓度的 C-V 曲线,此时第一拐点的电容数值几乎不随掺杂浓度而变化,但其所对应的电压却随着掺杂浓度的减少而迅速向低电压方向移动.这是因为覆盖层掺杂浓度越低,耗尽该层载流子所需的电压也就越低.

覆盖层的厚度及掺杂浓度不仅影响平台起始点的电容值及所对应的电压,而且还对平台的宽度产生影响.因为在平台的电压范围内,阱中载流子浓度随外加电压的增加而减少,直至全部耗尽.当覆盖层厚度增加时,由于电压的分压作用,使得降在量子阱上的分压相应减少,因此需要更大的外加偏压才能使阱中载流子浓度全部耗尽,这就使平台的宽度增大.同样地,当覆盖层掺杂浓度增加时,覆盖层中更多的载流子转移到阱内,

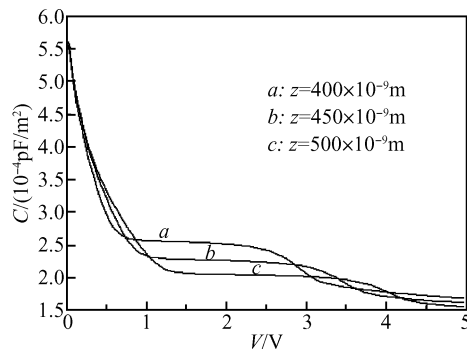


图 8 不同覆盖层厚度的 C-V 曲线(其余参数同表 1)

Fig.8 Different thickness of cap layers affect on the C-V characteristics profiles (The rest parameters are the same as Table 1)

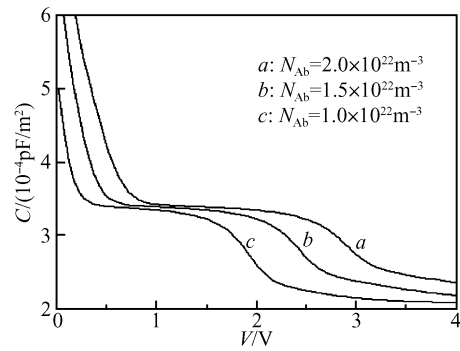


图 9 不同覆盖层掺杂浓度的 C-V 曲线(其余参数同表 1)

Fig.9 Different doping concentration of cap layers affect on the C-V characteristics profiles (The rest parameters are the same as Table 1)

也就需要更高的外加偏压才能使阱中载流子全部耗尽,平台的宽度也就随之增大.

图 10 显示了不同量子阱的掺杂浓度也对平台的形状,随着量子阱中的掺杂浓度提高,阱中的载流子浓度也就会相应增加,那就需要更高的外加电压才能耗尽阱中的载流子,因此平台宽度也就随着掺杂浓度的增加而增加.

5 结论

本文首先介绍了量子阱结构的 C-V 测试原理,采用有限深对称方势阱近似模型求解薛定谔方程得到 Ge/Si 量子阱中的子能级分布,对于势垒区的载流子浓度采用体材料的三维计算公式来获得,而对于势阱区的载流子浓度计算采用二维计算公式来获得,并基于迭代法数值求解泊松方程模拟计算了单量子阱结构样品在不同偏压下的载流子浓度分布和 C-V 特性.

模拟结果表明,当反向偏压为 0.7~2.6V 时,电容值变化很小,出现一个较为显著的平台.在此反向偏压范围内,外加电压的变化将使量子阱的能带发生变化,并使阱中的载流子浓度也随之变化,当反向偏压增大时,耗尽区边缘处载流子耗尽较少,即耗尽区向半导体

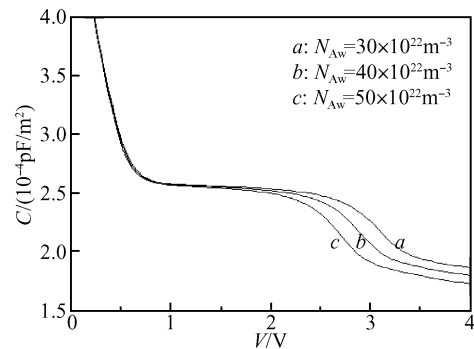


图 10 不同量子阱层掺杂浓度的 C-V 曲线(其余参数同表 1)

Fig.10 Different doping concentration of the QW layer affect on the C-V characteristics profiles (The rest parameters are the same as Table 1)

一侧扩展较小,电容变化很少.随着反向偏压的进一步增加,阱中载流子的浓度不断减少直至全部耗尽,此时耗尽区也开始向量子阱的另一侧硅材料缓冲层扩展,直至耗尽区内不再有载流子.

C-V 曲线上平台存在是量子阱结构 C-V 特性的显著特征,它与量子阱结构参数有密切的关系.随着覆盖层厚度的减小,C-V 曲线上平台起始点的电容值增加,并且向低电压方向移动直至其消失.随着量子阱中的掺杂浓度提高,阱中的载流子浓度也就会相应增加,那就需要更高的外加电压才能耗尽阱中的载流子,因此平台宽度也就随着掺杂浓度的增加而增加.当覆盖层厚度增加时,由于电压的分压作用,使得降在量子阱上的分压相应减少,因此需要更大的外加偏压才能使阱中载流子浓度全部耗尽,这就使平台的宽度增大.同样地,当覆盖层掺杂浓度增加时,覆盖层中更多的载流子转移到阱内,也就需要更高的外加偏压才能使阱中载流子全部耗尽,平台的宽度也就随之增大.

参考文献

- [1] Kroemer H, Chien W Y, Harris J S, et al. Measurement of isotype heterojunction barriers by C-V profiling. *Appl Phys Lett*, 1980, 36:259
- [2] Schubert E F, Kopf R F, Kuo J M, et al. Spatial resolution of the capacitance-voltage profiling technique on semiconductors with quantum confinement. *Appl Phys Lett*, 1990, 57:497
- [3] Shih Y C, Streetman B G. Modulation of carrier distributions in delta-doped quantum wells. *Appl Phys Lett*, 1991, 59:1344
- [4] Yamamoto N, Yokoyama K, Yamamoto M. Carrier profile evaluation for a Zn-doped InGaAsP/InGaAsP multi-quantum well using a low-temperature capacitance-voltage method. *Appl Phys Lett*, 1993, 62:252
- [5] Sundaram M, Gossard A C. Capacitance-voltage profiling through graded heterojunctions: theory and experiment. *J Appl Phys*, 1993, 73:251
- [6] Sundaram M, Allen S J, Gossard A C. Low-temperature carrier distributions in wide quantum wells of different shapes from capacitance-voltage measurements. *J Appl Phys*, 1994, 76:1003
- [7] Letartre X, Stievenard D, Barbier E. Analytical calculation of the capacitance associated with a single quantum well located in a junction. *J Appl Phys*, 1991, 69:7912
- [8] Lu Fang, Gong Dawei, Wang Jianbao, et al. Capacitance-voltage characteristics of a Schottky junction containing SiGe quantum wells. *Phys Rev B*, 1996, 53:4623
- [9] Brounkov P, Benyattou T, Guillot G. Simulation of the capacitance-voltage characteristics of a single-quantum-well structure based on the self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations. *J Appl Phys*, 1996, 80:864
- [10] Liu Enke, Zhu Bingsheng, Luo Jinsheng. *Semiconductor physics*. 6th ed. Beijing, Publishing House of Electronics Industry, 2003 (in Chinese)[刘恩科,朱秉升,罗晋生.半导体物理学.第6版.北京:电子工业出版社,2003]
- [11] Letartre X, Stievenard D, Lannoo M. Admittance spectroscopy measurement of band offset in GaAs-GaAlAs multiquantum. *J Appl Phys*, 1990, 68:116

A Simulation of the Capacitance-Voltage Characteristics of a Ge/Si Quantum-Well Structure

Cheng Peihong and Huang Shihua[†]

(Department of Physics, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004, China)

Abstract: The energy levels of a Ge/Si quantum well were obtained by solving the Schrödinger equation based on the finite potential well approximation. For the quantum well structure, the characteristics of capacitance-voltage (C-V) and the distribution of carrier concentration were derived in different bias voltage regions by analytically solving Poisson's equation. The appearance of a capacitance platform is a distinct characteristic of the C-V curve for quantum well structures, which is relative to the structure parameter of the quantum well. As the thickness of capping layer decreases, the starting capacitance of the C-V platform increases and shifts toward low reverse bias. As the doping concentration in the quantum well or the capping layer increases, a high reverse bias is needed to exhaust the carriers in the quantum well, and the platform width increases. The apparent carrier concentration distribution in the quantum well can be obtained from the C-V curve.

Key words: Ge/Si quantum-well; C-V characteristics; iterative method

PACC: 7280C; 7320D; 0260

Article ID: 0253-4177(2008)01-0110-06

[†] Corresponding author. Email: huangshihua@zjnu.cn

Received 25 June 2007