

# SiGe/ Ge/ SiGe 异质结构中自旋极化 输运特性的模拟<sup>\*</sup>

邹建平 田立林 余志平

(清华大学微电子学研究所, 北京 100084)

**摘要:** 利用蒙特卡罗方法对 SiGe/ Ge/ SiGe 异质结构的自旋极化输运特性进行了模拟研究. 在 Ge 沟道调制掺杂异质结构形成的二维空穴气中, 空穴的自旋进动主要受 Rashba 自旋轨道相互作用控制. 在 77 ~ 300 K 的温度范围内, 对自旋散射长度、自旋极化率等自旋极化输运特性进行了研究. 模拟结果显示, 低温和窄宽度沟道有利于减小散射对自旋极化输运的影响, 避免自旋极化率衰减, 增大自旋散射长度. 栅控的漏端电流自旋相关效应使器件跨导增大, 并产生负跨导效应.

**关键词:** 自旋场效应晶体管; Rashba 自旋轨道相互作用; 蒙特卡罗方法

**PACC:** 7170E; 7115Q

**中图分类号:** TN386

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2005)02-0299-05

## 1 引言

1988 年, 巨磁阻效应的发现标志着自旋电子学研究的开端<sup>[1]</sup>. 在自旋电子学中, 信息的载体不再仅仅是载流子的电荷, 载流子的自旋在信息的产生、传输、检测中将扮演更加重要的角色. 微电子学与自旋相关效应的结合, 为新型的自旋电子器件的产生提供了契机. 与传统的微电子器件相比, 自旋电子器件具有高速、低功耗、非挥发性、高集成度等优势. 近年来, 半导体中的自旋极化载流子输运成为自旋电子学中的研究热点. 1990 年, Datta 和 Das 提出了自旋场效应晶体管 (Spin-FET) 的概念<sup>[2]</sup>. Spin-FET 利用铁磁材料作为源和漏, 自旋极化的载流子在源端被注入到二维器件沟道中, 到达漏端的载流子依据其自旋方向被漏端选择性地收集. 栅电压通过 Rashba 自旋轨道相互作用<sup>[3]</sup> 控制沟道中载流子的自旋进动以及漏端的自旋极化电流. 除此之外, 一些利用自旋相关效应工作的半导体自旋电子器件也被广泛地研究<sup>[4~6]</sup>. 尽管如此, 在这些器件中, 自旋相关的一些输运参数, 诸如自旋散射长度、自旋极化率等仍然没有得到充分研究<sup>[7]</sup>. 为了彻底地理解自旋

相关的输运过程, 需要建立相应的输运模型并对其进行模拟研究.

近年来, 蒙特卡罗方法已经被用来研究类 Spin-FET 结构中的自旋极化输运过程<sup>[8,9]</sup>. 然而, 这些工作多数围绕  $\alpha$ - 族化合物半导体异质结构形成的二维电子气 (2DEG) 中的自旋极化输运过程. 针对基于  $\alpha$ - 族元素半导体异质结构形成的二维空穴气 (2DHG) 中的自旋极化输运研究几乎没有. 高空穴迁移率的 Ge 沟道调制掺杂异质结构 (SiGe/ Ge/ SiGe)<sup>[10]</sup> 为 2DHG 中的自旋极化输运研究提供了理想的模型结构. 最近, Andrievskii 等人<sup>[11]</sup> 在实验中发现: 在  $\alpha$ - 族元素半导体异质结构形成的 2DHG 中, 存在 Rashba 自旋轨道相互作用引起的自旋态分裂, 使得 Ge, Si 在 Spin-FET 中的应用成为可能. 此外, 较长的自旋相干时间<sup>[7]</sup> 以及成熟的工艺水平也使得 Ge, Si 材料在自旋电子器件中具有更加广泛的应用前景.

本文利用蒙特卡罗方法研究了 Ge 沟道调制掺杂异质结构形成的 2DHG 中的自旋极化输运过程, 并给出自旋散射长度、自旋极化率等输运参数随着沟道尺寸大小以及模拟温度的变化行为, 为实现 Spin-FET 的器件提供合适的结构和优化的参数.

<sup>\*</sup> 国家重点基础研究发展规划资助项目 (批准号: 2002CB311907)

邹建平 男, 1975 年出生, 博士后, 现从事半导体中自旋极化输运的研究. Email: jpzou@tsinghua.edu.cn

2004-02-17 收到, 2004-05-31 定稿

## 2 自旋极化运输模型

图 1 是模拟所采用的 Ge 沟道调制掺杂异质结构和价带示意图. 本征的 Ge 沟道层 (层厚  $d = 10\text{nm}$ ) 被夹在两层本征  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 0.7$ ) 间隔层之间, p 型  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 0.7$ ) 掺杂层提供载流子. 2DHG 形成在 Ge 沟道层一侧, 空穴被限制在类三角形形势阱中.  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  间隔层使沟道层中的载流子与掺杂层中的电离杂质在空间上分开, 从而有效地避免载流子的电离杂质散射, 提高了载流子的迁移率.

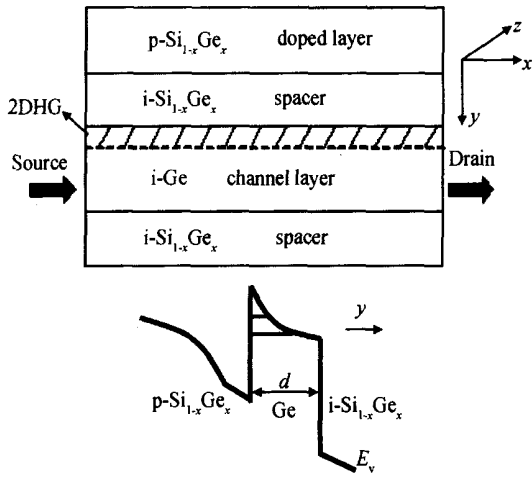


图 1 Ge 沟道调制掺杂异质结构以及价带示意图

Fig. 1 Schematic and valence band diagram of the Ge channel modulation-doped heterostructure

在缺少外磁场的情况下, 类似图 1 所示的调制掺杂异质结构中, 载流子的自旋演变主要受自旋轨道的相互作用控制. 引起自旋轨道相互作用的机制主要有两个: DP 机制<sup>[12]</sup>和 Rashba 机制<sup>[3]</sup>. DP 机制通常存在于闪锌矿等非中心对称晶体中, 而 Rashba 机制则来源于非对称量子阱诱导的自旋轨道耦合. 此外, 在窄带隙半导体异质结构中, Rashba 机制被认为是控制自旋动力学的主导机制<sup>[13]</sup>. 由于图 1 所示结构采用的是未掺杂纯 Ge 沟道, 因此, DP 机制可不予考虑, 而 Rashba 自旋轨道相互作用是蒙特卡罗模拟中唯一需要考虑的自旋动力学控制机制.

在调制掺杂异质结构中, Rashba 自旋轨道的相互作用源于垂直异质界面方向势阱的非对称性. Rashba 自旋轨道相互作用诱导产生一个自旋进动矢量  $\mathbf{R}$ . 在  $\mathbf{R}$  的作用下, 载流子自旋方向在自由飞行过程中发生连续进动. 对于在  $xz$  平面内形成的 2DHG, 根据 Lommer 等人<sup>[13]</sup>给出的 Rashba 哈密

顿量形式, 可得:

$$\mathbf{R} = \frac{2 a_{46} E_y}{\hbar} (-k_z \boldsymbol{\mu}_x + k_x \boldsymbol{\mu}_z) \quad (1)$$

其中  $E_y$  代表栅控的异质界面垂直电场强度;  $a_{46}$  则是与形成 2DHG 的材料相关的常数;  $k_x$  和  $k_z$  是载流子波矢在  $x$  方向和  $z$  方向的分量;  $\boldsymbol{\mu}_x$  和  $\boldsymbol{\mu}_z$  则是  $x$  方向和  $z$  方向的单位矢量. 根据方程 (1) 可知:  $\mathbf{R}$  的方向与载流子波矢方向垂直, 其大小随着  $E_y$  的增加而增大.

在  $\mathbf{R}$  作用下, 载流子自旋进动的驱动方程如下:

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \mathbf{R} \times \mathbf{S} \quad (2)$$

式中  $\mathbf{S}$  代表载流子自旋矢量. 模拟过程中的核心问题就是在每个自由飞行过程中求解载流子自旋进动驱动方程, 追踪载流子自旋方向在运输过程中的变化.

模拟中应用了较低的纵向驱动电场  $E_x$  ( $2\text{kVcm}^{-1}$ ) 以及足够窄的势阱. 这样的条件使得模拟可以采用简化的势阱单子带 (第一子带) 模型, 并且能带的非抛物性影响可被忽略. 载流子的空间运动采用常规的二维运输的蒙特卡罗方法来处理<sup>[14]</sup>, 即  $y$  方向的运动是量子化的, 而  $xz$  平面内的运输仍采用半经典的方法来处理. 垂直异质界面的电场分布  $E_y$  是通过泊松方程与垂直异质界面的薛定谔方程的自洽求解得到的, 并且在每个时间步的开始对异质界面的垂直电场分布  $E_y$  进行更新. 模拟中假定  $z$  方向沟道宽度的边界条件为镜面反射, 即载流子到达  $z$  方向边界时, 经受一次镜面反射, 波矢的  $z$  方向分量大小不变, 方向相反. 由于模拟的对象是调制掺杂的异质结构, 因此在散射机制的选择中排除了电离杂质散射, 只考虑声学波形势散射和光学波形势散射. 表 1 列出了 Ge 的材料参数以及散射参数.

表 1 Ge 的材料参数与散射参数

Table 1 Material parameters and scattering parameters of Ge

材料参数	数值	散射参数	数值
密度	$5.32\text{g/cm}^3$	纵向声速 $s_l$	$5.4 \times 10^5\text{cm/s}$
空穴有效质量	$0.30 m_0$	横向声速 $s_t$	$3.2 \times 10^5\text{cm/s}$
态密度有效质量	$0.31 m_0$	声学形变势常数	$4.6\text{eV}$
相对介电常数	16.0	光学形变势常数 $D_0$	$9.0 \times 10^8\text{eV/cm}$
		光学声子能量	$37.1\text{meV}$

### 3 模拟结果与讨论

模拟的沟道长度  $L_x = 0.8\mu\text{m}$ , 纵向加速电场  $E_x = 2\text{kV/cm}$ , 温度  $T = 77 \sim 300\text{K}$ . 载流子的自旋方向通过其自身的球坐标加以定义. 100% 自旋极化的载流子 (注入自旋极化率  $P_0 = 100\%$ ) 在沟道的左边界 ( $x = 0$ ) 被注入沟道, 在  $E_x$  的作用下, 载流子运动到达右边界 ( $x = 800\text{nm}$ ) 时被吸收, 与此同时在左边界重新注入一个新的载流子, 以确保模拟过程中载流子的数目保持恒定. 选择  $P_0 = 100\%$  这一理想情况的目的是为了更清楚地展示自旋相关效应. 而在现阶段的实验条件下, 能够获得的注入自旋极化率远远低于 100%, 因此很难直接观测到明显的自旋相关现象. 模拟的取样时间步程  $t = 3\text{fs}$ . 为了获得稳态的运输特性, 模拟程序运行 10000 个时间步程, 并且仅在最后 1000 个时间步程内收集数据.

图 2 给出了温度  $T = 300\text{K}$ , 异质界面垂直电场  $E_y = 100\text{kV/cm}$  条件下, 空穴的自旋极化率沿着沟道长度方向的变化情况. 四条曲线分别对应于沟道宽度  $W = 10, 30, 50, 70\text{nm}$  的情形. 四种情形下的自旋极化率沿着沟道都呈现出极化振荡的现象, 反映了 Rashba 自旋轨道相互作用对于空穴自旋方向的影响. 图 2 中更加值得关注的是沟道宽度对于自旋极化运输的影响. 随着沟道宽度  $W$  的增加, 运输过程出现了明显的自旋弛豫现象, 导致自旋极化率的振幅逐渐衰减, 而且  $W$  越大, 衰减得越快. 当  $W = 70\text{nm}$  时, 在沟道右边界 (漏端) 处的自旋极化率几乎衰减为 0. 较低的自旋极化率将不足以维持实际器件工作所需的自旋相关效应, 因此沟道的宽度对于实际的器件设计是一个重要的优化参数. 这里引入一个运输参数——自旋散射长度  $L_{\text{spin}}$ , 来描述自旋极化率衰减到注入自旋极化率的  $1/e$  时的距离. 图 3 给出了  $T = 300\text{K}$ ,  $E_y = 150\text{kV/cm}$  情形下, 自旋散射长度  $L_{\text{spin}}$  随沟道宽度  $W$  的变化情况. 从图 3 中可以明显看出,  $L_{\text{spin}}$  随着  $W$  的增大呈指数衰减.

由图 2 和图 3 可以发现, 当沟道的宽度很小时, 自旋极化率几乎没有衰减, 自旋散射长度也相当长. 由于载流子在沟道中受到的散射使其波矢方向随机化, 从而导致自旋进动矢量  $\mathbf{R}$  的随机化. 由  $\mathbf{R}$  所控制的载流子自旋进动也将随机化, 产生自旋弛豫现象, 导致自旋极化率的衰减. 真正引起自旋极化率衰减的因素是  $\mathbf{R}$  中载流子波矢分量  $k_z$ . 根据自旋

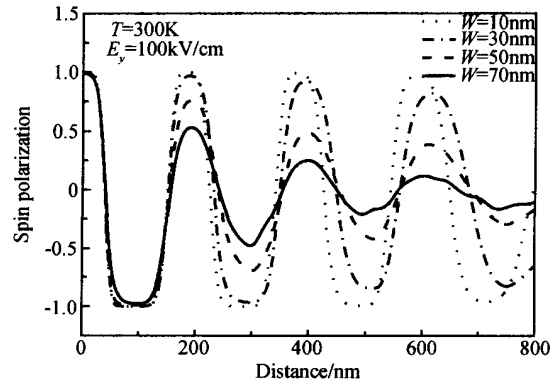


图 2 自旋极化率沿着 Ge 的 2DHG 沟道长度方向的变化  
Fig. 2 Evolution of the spin polarization along the direction of a Ge 2DHG channel

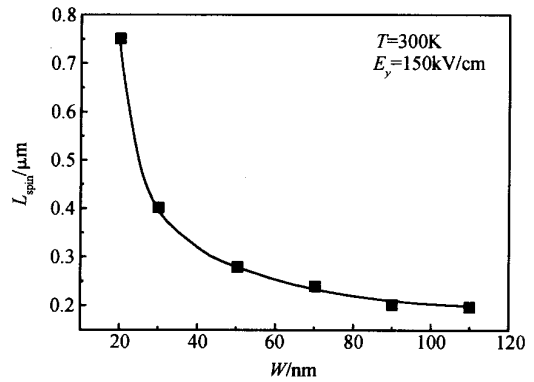


图 3 自旋散射长度  $L_{\text{spin}}$  随沟道宽度  $W$  的变化  
Fig. 3 Spin scattering length  $L_{\text{spin}}$  as a function of channel width  $W$

进动驱动方程 (2), 可以将  $k_z$  项对自旋进动的影响看作一个微扰, 这一微扰粗略地与载流子在沟道宽度  $z$  方向的位移成比例. 当沟道宽度被限制在载流子的平均自由程之内甚至更短时, 由于  $z$  方向镜面反射的边界条件, 载流子在一次自由飞行过程中将受到  $z$  方向边界的多次反射, 使得载流子在  $z$  方向的平均位移趋近于 0, 即  $k_z$  项对自旋进动的影响趋近于 0. 因此相对于宽沟道而言, 窄沟道中的自旋极化率衰减的很慢, 自旋散射长度也相应较长. 从图 2 可以看出当沟道宽度  $W = 30\text{nm}$  时, 自旋极化率在模拟的沟道长度内几乎没有衰减, 这与文献 [11] 所报道的空穴平均自由程 ( $l = 31\text{nm}$ ) 一致.

除了沟道宽度外, 模拟温度对自旋极化的运输也有相当大的影响. 图 4 给出了  $E_y = 100\text{kV/cm}$ ,  $W = 70\text{nm}$  情况下, 自旋极化率沿着沟道长度方向的

变化. 图中的两条曲线分别对应于  $T = 77\text{ K}$  和  $T = 300\text{ K}$  的情况. 尽管沟道宽度被限定在同一个值, 但是温度的差异仍然使得两种情况下的自旋输运有所区别. 当温度升高时, 空穴迁移率有所下降, 因此空穴渡越沟道的时间也相应增加. 渡越时间的增加使得空穴将经受更多的散射, 从而引起沟道中自旋极化率的逐步衰减. 相对于  $77\text{ K}$  的模拟温度,  $T = 300\text{ K}$  时的自旋极化率衰减得更快. 从图中可以大致估算出  $T = 300\text{ K}$  时, 自旋散射长度  $L_{\text{spin}}$  约为  $300\text{ nm}$ , 而  $T = 77\text{ K}$  时, 自旋散射长度  $L_{\text{spin}}$  明显已经超出了模拟的沟道长度范围.

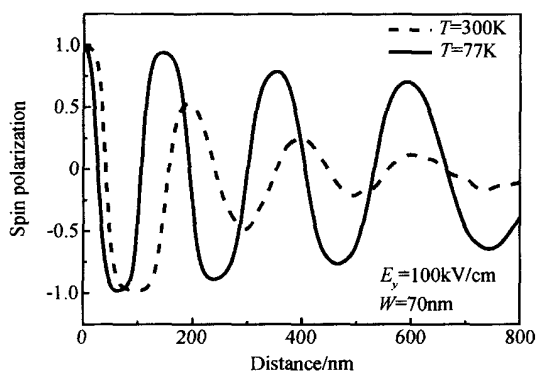


图 4  $T = 77\text{ K}$  和  $300\text{ K}$  情况下, 自旋极化率沿着 Ge 的 2DHG 沟道长度的变化

Fig. 4 Spin polarization variations along a Ge 2DHG channel for two different values of temperatures  $T = 77\text{ K}$  and  $300\text{ K}$ , respectively

在 Spin-FET 中, 漏端电流  $I_D$  的变化依赖于到达漏端的载流子自旋方向与漏端磁化方向的比较, 所以漏端电流  $I_D$  受到漏端自旋极化率  $P(L_x)$  的调节作用. 图 5 是根据文献[15]给出的  $I_D$  表达式, 结合  $T = 300\text{ K}$ ,  $W = 10\text{ nm}$  情况下漏端自旋极化率  $P(L_x)$  随  $E_y$  变化的模拟结果, 计算出漏端电流随异质界面垂直电场的变化行为. 为了利于比较, 同时计算出经典的调制掺杂高迁移率晶体管情形下 (注入自旋极化率  $P_0 = 0\%$ )  $I_D$  和  $E_y$  之间的关系. 插图显示的就是  $P(L_x)$  随  $E_y$  的变化行为, 可见漏端自旋极化率随着异质界面垂直电场的变化呈现出同样的极化振荡现象, 由此引起了漏端电流的极化振荡. 这种漏端电流的极化振荡现象明显区别于经典高迁移率晶体管情形下  $I_D$  和  $E_y$  之间近似线性的关系. 漏端电流达到极小值时, 对应于到达漏端的载流子自旋方向多数与漏端的磁化方向相反; 漏端电流达

到极大值时, 则对应于到达漏端的载流子自旋方向多数与漏端的磁化方向相同. 此外, 漏端电流的极化振荡也使得  $E_y$  在某些范围内, 器件的跨导相比于经典高迁移率晶体管有明显提高, 特别值得注意的是  $E_y$  在另一些范围内, 跨导还会出现负值. 这样的非线性效应在自旋电子器件应用中具有广阔的前景.

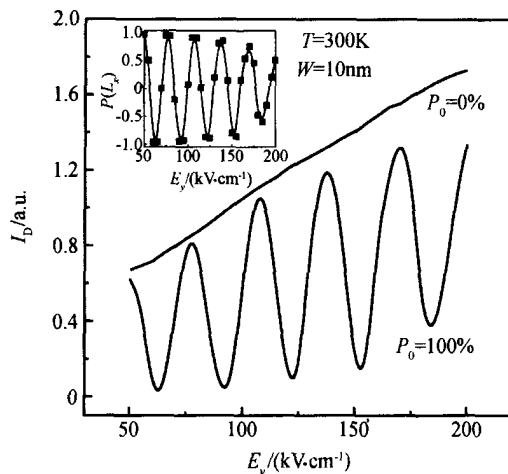


图 5 漏端电流  $I_D$  随着异质界面垂直电场  $E_y$  的变化  
插图: 漏端自旋极化率  $P(L_x)$  随着异质界面垂直电场  $E_y$  的变化.

Fig. 5 Drain current varies with perpendicular electric field  $E_y$ . The inset shows spin polarization  $P(L_x)$  at the end of the channel against perpendicular electric field  $E_y$ .

## 4 结论

利用蒙特卡罗方法对 SiGe/Ge/SiGe 异质结构中的自旋极化输运特性进行了模拟研究. 在 Ge 沟道调制掺杂异质结构形成的 2DHG 中, 空穴的自旋动力学主要由 Rashba 自旋轨道相互作用控制. 沟道中的散射将使得自旋进动中的空穴产生自旋弛豫, 导致自旋极化率衰减. 沟道的宽度越大, 模拟的温度越高, 自旋极化率在输运过程中衰减得越厉害, 自旋散射长度也相应地减小. 漏端电流的非线性极化振荡带来的器件跨导的提高以及负跨导效应为 Spin-FET 将来的应用提供了广阔的前景.

## 参考文献

[1] Baibich M N, Broto J M, Fert A, et al. Giant magnetoresistance

- of (001) Fe/(001) Cr magnetic superlattices. Phys Rev Lett , 1988 ,61 :2472
- [ 2 ] Datta S, Das B. Electronic analog of the electro-optic modulator. Appl Phys Lett ,1990 ,56:665
- [ 3 ] Bychkov Y A , Rashba E I. Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy. Sov Phys JETP Lett ,1984 ,39 : 78
- [ 4 ] Flatte M E, Vignale G. Unipolar spin diodes and transistors. Appl Phys Lett ,2001 ,78 :1273
- [ 5 ] Koga T, Nitta J, Takayanagi T. Spin-filter device based on the Rashba effect using a nonmagnetic resonant tunneling diode. Phys Rev Lett ,2002 ,88 :126601
- [ 6 ] Schliemann J , Egues J C, Loss D. Nonballistic spin-field-effect transistor. Phys Rev Lett ,2003 ,90 :146801
- [ 7 ] Wolf S A , Awschalom D D , Buhrman R A , et al. Spintronics : A spin-based electronics vision for the future. Science ,2001 ,294 : 1488
- [ 8 ] Bournel A , Delmouly V , Dollfus P , et al. Theoretical and experimental considerations on the spin field effect transistor. Physica E ,2001 ,10 :86
- [ 9 ] Saikin S , Shen M , Cheng M C , et al. Semiclassical monte carlo model for im-plane transport of spin-polarized electrons in - heterostructures. J Appl Phys ,2003 ,94 :1769
- [ 10 ] Irisawa T , Miura H , Ueno T , et al. Channel width dependence of mobility in Ge channel modulation-doped structures. Jpn J Appl Phys ,2001 ,40 :2694
- [ 11 ] Andrievskii V V , Rozheshchenko A Y , Komnik Y F , et al. Quantum interferometry and spin-orbit effects in a heterostructure with a 2D hole gas in a  $Si_{0.2}Ge_{0.8}$  quantum well. Low Temp Phys ,2003 ,29 :318
- [ 12 ] Pikus G E , Titkov A N. Optical orientation. New York : Elsevier Science ,1984 :73
- [ 13 ] Lommer G , Malcher F , Rossler U. Spin splitting in semiconductor heterostructures for  $B > 0$ . Phys Rev Lett ,1988 ,60 :728
- [ 14 ] Jacoboni C , Lugli P. The monte-carlo method for semiconductor device simulation. Wien-New York : Springer-Verlag ,1989
- [ 15 ] Bournel A , Dollfus P , Galdin S , et al. Modelling of gate-induced spin precession in a striped channel high electron mobility transistor. Solid State Commun ,1997 ,104 :85

## Simulation of Spin-Polarized Transport in SiGe/Ge/SiGe Heterostructure \*

Zou Jianping , Tian Lilin , and Yu Zhiping

(Institute of Microelectronics , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

**Abstract :** The Monte Carlo approach is utilized to study spin-polarized transport in SiGe/Ge/SiGe heterostructure. The hole spin precession is controlled by the Rashba spin-orbit interaction in 2DHG formed in Ge channel modulation-doped structure. Spin-polarized properties ,including the spin scattering length and the spin polarization ,are investigated at the temperature ranging from 77 to 300 K. Simulation results from Monte-Carlo show that at a low temperature or by a narrow 2D-channel ,the spin relaxation can be effectively reduced and the spin scattering length can be increased. The gate-controlled spin effect of the drain current induces a large improvement of transconductance ,or a negative transconductance effect.

**Key words :** spin-FET ; Rashba spin-orbit interaction ; Monte Carlo approach

**PACC :** 7170E ; 7115Q

**Article ID :** 0253-4177(2005)02-0299-05

\* Project supported by State Key Development Program for Basic Research of China(No. 2002CB311907)

Zou Jianping male ,was born in 1975 ,postdoctor. He is engaged in the research on spin-polarized transport in semiconductors.

Received 17 February 2004 ,revised manuscript received 31 May 2004

© 2005 Chinese Institute of Electronics