

势垒区 δ 摻杂量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 的电子能带结构及电子密度分布

徐至中

(复旦大学物理系 上海 200433)

摘要 在有效质量近似基础上,采用非均匀网格有限差分法,通过对薛定谔一泊松方程的自洽求解,得到了生长在 $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ (001)衬底上的势垒区 δ 摻杂量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 的势位及电子密度分布。讨论了量子阱的几何结构参数——阱宽及 δ 摻杂位置和 δ 摻杂密度对势阱内电子密度分布的影响。

PACC: 7340L

1 引言

采用调制掺杂技术^[1],可以有效地避免电离杂质散射,因而可以极大地提高载流子的低温迁移率。几年前,在 Si 衬底上已成功地生长出 P 型调制掺杂异质结 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.15}\text{Si}_{0.85}$,在 1.4K 下的空穴迁移率可达 $7000\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ ^[2]。为了生长出 n 型调制掺杂异质结,必须使 Si 层处于横向伸长的应力状态下,因而必须采用晶格常数较大的 GeSi 合金作为衬底。近年来也已成功地生长出 n 型调制掺杂异质结 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$,在 4.2K 下,已观察到电子的最大迁移率可达 $160000\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$,但是采用调制掺杂技术,在势垒高度不是很高的情况下,量子阱中的载流子密度常受到限制,因而仍不能很好地提高低温电导率^[4,5]。采用 δ 调制掺杂技术可以使量子阱中的载流子密度成倍地增加。Chico 等^[6]对势垒区 δ 摻杂量子阱 $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 从理论上进行了计算;沈昌九等^[7]对生长在 GaAs 衬底上的 δ 调制掺杂异质结 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ 及生长在 InP 衬底上的 δ 调制掺杂异质结 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ 进行了计算。讨论了量子阱中的载流子密度随 δ 摻杂浓度及 δ 摻杂位置(δ 摻杂层离量子阱边的距离)的变化关系。本文采用有效质量近似下的包络函数方法对势垒区 δ 摻杂量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 进行了自洽计算。计算中也考虑了多体效应的影响。

徐至中 男,1938 年生,教授,从事半导体表面及界面的电子态理论研究及固体物理教学工作
1995 年 1 月 16 日收到初稿,1995 年 5 月 13 日收到修改稿

2 计算模型和方法

这里讨论在合金衬底 $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ (001)上生长的量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$, 因此在 $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 合金层中不存在应变, 而在 Si 层中存在有横向伸长的应变。在此应变下, 导带底的六个椭球等能面的简并能级发生分裂, [001] 及 [0001] 椭球面能级低于其它四个椭球面能级; 价带顶轻、重空穴能级也发生分裂, 轻空穴能级高于重空穴能级。取硅的导带底的单轴畸变势常数 $v_u = 8.5 \text{ eV}$, 价带顶单轴畸变势常数 $D_u = 2.04 \text{ eV}$, 间接带隙的体畸变势常数 $(v_d + \frac{1}{3}v_u - a) = 3.81 \text{ eV}$, 可计算得应变后 Si 能隙的变化。再应用 Bean^[8] 给出的生长在 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 合金衬底上的 $\text{Si}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 异质结的价带顶能带不连续值(band-offset) ΔE_v 的经验公式:

$$\Delta E_v(x, y) = (0.84 - 0.53y)x$$

及 Weber 和 Alonso^[9] 给出的 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 合金能隙的经验公式

$$E_y(x) = E_0 - 0.43x + 0.206x^2$$

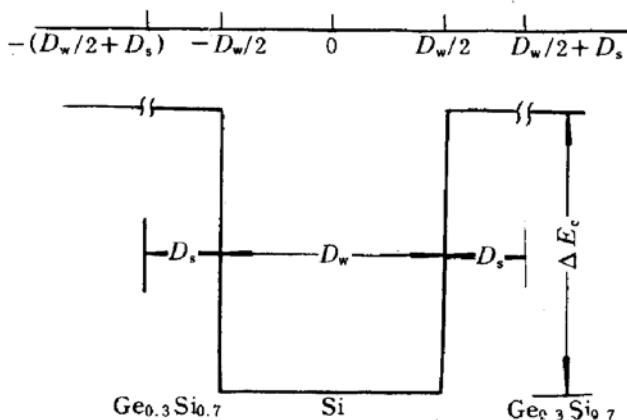


图 1 势垒区 δ 摻杂量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 的计算模型
“x”表示 δ 摻杂位置。

(式中 E_0 为 Si 的能隙, 取值 1.155 eV), 可计算得生长在 $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ (001)衬底上的量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 的势垒高度 $\Delta E_v \approx 183.07 \text{ meV}$ 。与 Stern 和 Laux^[10] 根据实验结果估算得到的结果 $180 \pm 15 \text{ meV}$ 很好相符。

这里的计算模型如图 1 所示, 在离势阱边 D_s 处作 δ 摻杂。考虑到在具体实验制作过程中, 施主杂质会发生扩散, 因此这里假设杂质在[001]方向作高斯分布:

$$\rho_d(z) = \frac{N_d}{\sqrt{\pi} dl} e^{-[z(D_w/2 + D_s)]^2/dl^2} \quad (1)$$

在计算中取 $dl = 2 \text{ nm}$ 。式中 N_d 是 δ 摻杂的杂质面密度。考虑到势阱两边均作 δ 摻杂, 因此

量子阱中总的掺杂面密度为 $2N_d$ 。

在有效质量近似下, 势阱中的电子状态由下面薛定谔方程决定:

$$[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} (\frac{1}{m_i^*(z)} \frac{d}{dz}) + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_i^*} + V(z)]\varphi_j(z) = E_j(k_x, k_y)\varphi_j(z) \quad (2)$$

式中 m_i^* 表示势阱层 Si 的导带电子横向有效质量; $m_i^*(z)$ 表示导带电子纵向有效质量, 在势阱区内取 Si 材料的值, 在势阱区中取 $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 合金的值。这里忽略应变对 Si 电子有效质量的影响, 仍近似地取用体 Si 的有效质量值。对 $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 合金的有效质量近似地取 Ge 和 Si 的有效质量的线性平均值, 式中 $V(z)$ 是电子的势位, 由下式给出:

$$V(z) = V_s(z) + V_H(z) + V_{xc}(z) \quad (3)$$

其中 $V_s(z)$ 表示导带边不连续所引起的势位:

$$V_s(z) = \begin{cases} 0 & -D_w/2 < z < D_w/2 \\ \Delta E_v & |z| > D_w/2 \end{cases} \quad (4)$$

在下面的计算中均取 Si 的导带底能级为能量零点。 $V_H(z)$ 是由电子电荷及电离的杂质离子

电荷所引起的静电势，由下面的泊松方程决定：

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon(z) \frac{dV_H(z)}{dz} \right) = 4\pi e^2 [\rho_d(z) - n(z)] \quad (5)$$

式中 $\epsilon(z)$ 是介电常数，势阱中取 Si 的值 11.7，势垒中取合金 Ge_{0.3}Si_{0.7} 的值 12.99（近似地取 Ge 的介电常数和 Si 的介电常数的线性平均值）。 e 是电子电荷值。 $\rho_d(z)$ 表示电离杂质密度，由(1)式给出。 $n(z)$ 表示电子密度，由下式给出：

$$n(z) = \sum_{j, k_x, k_y} f[E_F - E_j(k_x, k_y)] |\varphi_j(z)|^2 \quad (6)$$

其中 $f(x)$ 表示费米分布函数。因为这里主要考虑低温下的情况，所以在计算中，只考虑 $T=0K$ 的情况， $V_{xc}(z)$ 表示由电子间的交换-关联作用引起的势位，这里采用 Hedin 及 Lundquist^[11] 提出的近似形式：

$$V_{xc}(z) = -\beta(x) \frac{e^2}{\pi} [3\pi^2 n(z)]^{1/3} \quad (7)$$

其中

$$\beta(x) = 1 + Bx \ln(1 + \frac{1}{x}) \quad (8)$$

$$x = \frac{1}{A} \left[\frac{4\pi}{3} n(z) \right]^{-1/3} \quad (9)$$

式中 A 及 B 是两个常数， $A=21a_B$ (a_B 为波尔半径)， $B=0.7734$ 。

根据以上各式就可以进行自洽计算。先假设一个初始的电子密度分布 $n^0(z)$ ，根据(5)及(7)式求出 $V_H(z)$ 及 $V_{xc}(z)$ 。把它们代入(3)式后就可求解薛定谔方程(2)式，并求得本征能量 $E_j(k_x, k_y)$ 及波函数 $\varphi_j(z)$ 。然后由(6)式求得一次叠代后的电子密度 $n^{(1)}(z)$ 。在求解(6)式时，先根据电中性条件决定费米能级有 E_F ：

$$\int_{-\infty}^{\infty} n(z) dz = 2N_d \quad (10)$$

求得 $n^{(1)}(z)$ 后，重复以上步骤可得叠代 n 次以后的电子密度 $n^{(n)}(z)$ ，并由(3)~(9)式求得 n 次叠代后的量子阱势位分布 $V^{(n)}(z)$ 。当 $|V^{(n)}(z) - V^{(n-1)}(z)| \leq \epsilon$ 时，(ϵ 为事先设定的可允许的误差，这里取值 $\epsilon=0.1\text{meV}$)，则认为达到自洽。

在求解(2)及(5)式时，采用了 Tun 等人提出的非均匀网格的有限差分法^[12]。

3 计算结果

图 2 示出了自给计算得到的量子阱势位结构图。图中也示出了三个量子阱的最低束缚能级及其相应的电子波函数，它们分别用长划线、短划线及点划线表示。图中的粗实线表示费米能级。(a)、(b)、(c)、(d) 分别表示各种阱宽 D_w 及各种掺杂面密度 N_d 的不同情况：(a) $N_d=0.5\times10^{12}\text{cm}^{-2}$, $D_w=6\text{nm}$ ；(b) $N_d=10^{12}\text{cm}^{-2}$, $D_w=6\text{nm}$ ；(c) $N_d=0.5\times10^{12}\text{cm}^{-2}$, $D_w=9\text{nm}$ ；(d) $N_d=10^{12}\text{cm}^{-2}$, $D_w=9\text{nm}$ 。这里的 δ 掺杂离阱边的距离 D_s 都等于 5nm。从图中可以看到随着掺杂面密度 N_d 的增大，由于阱内电子密度的增加，电子的静电势也相应增加，导致势阱底部中心逐渐隆起，势阱边界处的势垒尖峰也相应提高。当阱宽 D_w 变大时，这种变化更为显著，从图 2(c) 可见，即使在 $N_d=0.5\times10^{12}\text{cm}^{-2}$ 的情况下，较宽势阱的底部已开

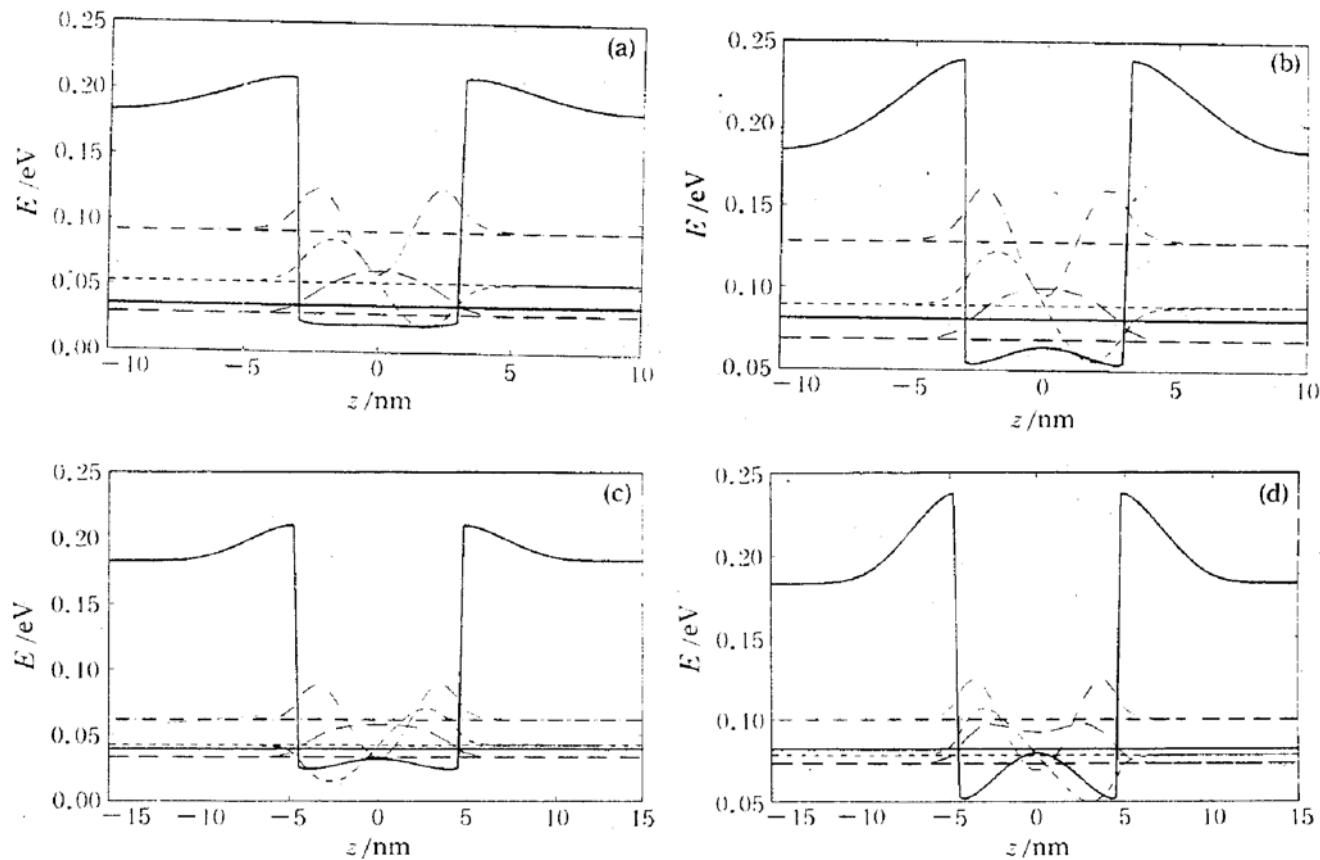


图 2 势垒区 δ 摊杂量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 势位分布的自洽计算结果

始隆起。当 $N_d = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时, 势阱底部隆起的能量已超过阱中基态及第一激发态的能级, 因此使基态波函数也发生变形, 由原来一个峰值变成两个峰值。可以想象, 随着阱宽逐渐扩大, 整个量子阱就逐渐变成两个独立的异质结界面, 在异质结界面处各自形成一个三角势阱。

图 3(a)及(b)分别给出阱宽 $D_w = 6 \text{ nm}$ 及 9 nm 时的电子密度 $n(z)$ 的分布情况。图中实

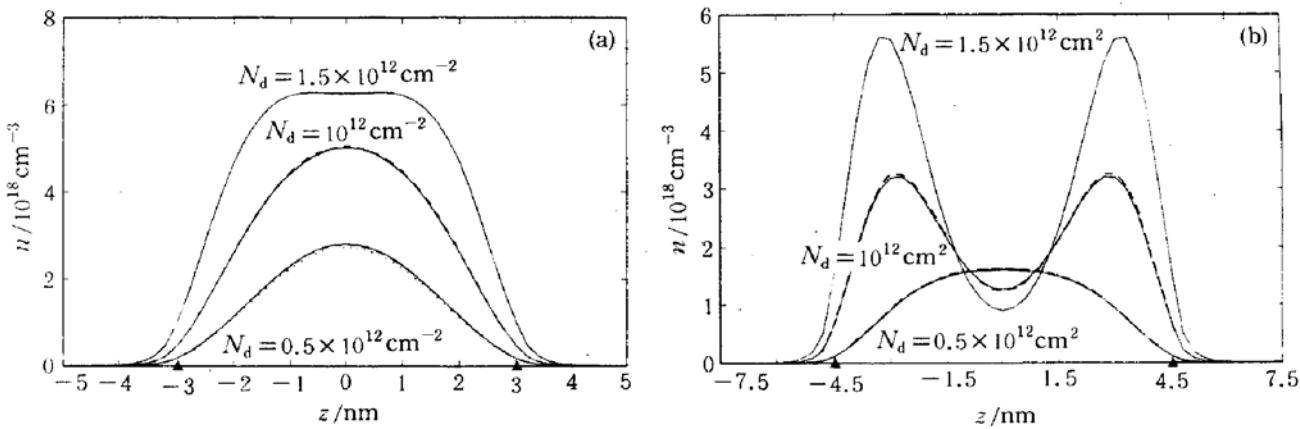


图 3 势垒区 δ 摊杂量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 的电子密度 $n(z)$ 的分布情况

(a) $D_w = 6 \text{ nm}$ (b) $D_w = 9 \text{ nm}$, “▲”表示势垒和势阱的边界处。

线、短划线及点线分别表示 δ 摊杂离阱边距离 $D_s = 5, 8$ 及 12 nm 时的情况。从图中可以看到

实线、短划线及点线三条曲线基本上相互重合，这说明电子密度 $n(z)$ 基本上与 δ 掺杂位置 D_s 无关。不同的掺杂位置 D_s ，都有相同的电子密度 $n(z)$ 。而电子密度 $n(z)$ 与掺杂面密度 N_d 及阱宽 D_w 有密切关系。当 N_d 逐渐增加时， $n(z)$ 不仅在数量上逐渐增加，而且其分形状也发生改变。在 $D_w=6\text{nm}$ 的情况下，当 $N_d=1.5\times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ 时， $n(z)$ 开始显现出两个峰值；而在 $D_w=9\text{nm}$ 情况下，当 $N_d=10^{12}\text{cm}^{-2}$ 时， $n(z)$ 就出现明显的双峰。考虑到处在阱边的电子会受到较大的电离杂质散射和界面散射，因此为了得到较大的迁移率，不能取太大的阱宽 D_w 和掺杂面密度 N_d 。

由图3可以看到，大部分电子密度都集中在阱内，但也有一部分电子密度分布在阱边的势垒区。随着掺杂面密度 N_d 的增加，处在势垒区的电子数也将增加。图4示出了势阱内的电子面密度 $2N_s$ 与势阱两侧总的 δ 掺杂面密度 $2N_d$ 之比 N_s/N_d 与掺杂面密度 N_d 之间的变化关系。 N_s/N_d 与 δ 掺杂位置 D_s 基本上没有关系，而与阱宽 D_w 稍有关系。从图中可以看到，对不同的阱宽 D_w ， N_s/N_d 的变化也不太大，而且不管在哪种情况下，绝大部分电子都集中在阱区内。

从图2可以看到，费米能级 E_F 随着 N_d 的增大而逐渐上升。另方面 E_F 也随着 δ 掺杂位置 D_s 的增大而上升。（这是由于随着 D_s 的增加，阱内电子负电荷与 δ 掺杂处的电离杂质正电荷间距离也随之增大，因此使它们间的相对电位差也随着增加，势阱底及势垒尖峰也相应提高，最后，也导致费米能级 E_F 位置也相应提高）。当费米能级 E_F 位置与施主杂质能级位置相一致时，阱内的电子密度将不再随 N_d 的增加而增加，因此对各种 D_s 值，都存在有一个最大的掺杂面密度 $\text{Max}(N_d)$ ，当超过该值时，阱内电子密度不会再继续增加。图5示出了

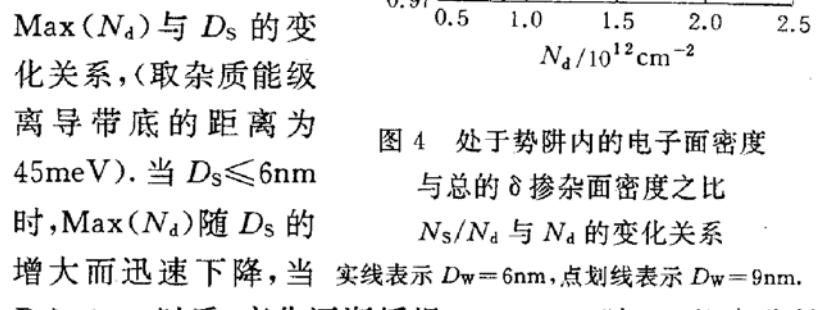


图4 处于势阱内的电子面密度

与总的 δ 掺杂面密度之比

N_s/N_d 与 N_d 的变化关系

实线表示 $D_w=6\text{nm}$ ，点划线表示 $D_w=9\text{nm}$ 。

$D_s > 6\text{nm}$ 以后，变化逐渐缓慢。 $\text{Max}(N_d)$ 随 D_s 的变化情况与阱宽 D_w 无关，不同的阱宽都有相同的变化曲线。为了减小电离杂质对阱内电子的散射，总希望 D_s 越大越好。但 D_s 变大后，使掺杂面密度的最大值 $\text{Max}(N_d)$ 受到限制，因而也使阱内的电子密度受到限制，最后使电导率的提高也受到制约。但与调制掺杂的情况相比， δ 掺杂仍能得到较大的电子密度。根据Stern及Laux^[10]的计算结果，在

调制掺杂情况下，当掺杂浓度 $N_d=2\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 时， $D_s=5, 10, 15\text{nm}$ 的阱内电子面密度大约分别为 $1.1\times 10^{12}, 0.8\times 10^{12}$ 及 $0.6\times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ ；而在 δ 掺杂情况下，当 $D_s=5,$

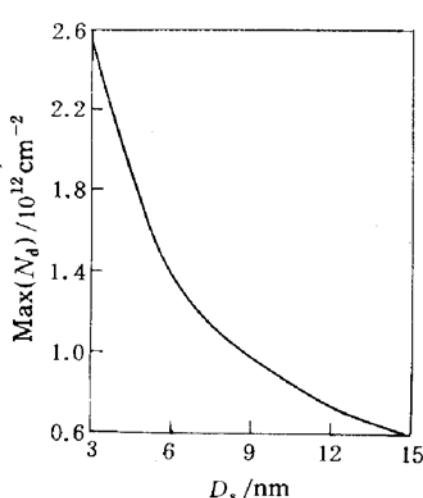


图5 最大的掺杂面密度 $\text{Max}(N_d)$ 与 δ 掺杂位置（离势阱边的距离） D_s 之间的变化关系

这里取杂质能级离导带边的距离为45meV。

10、15nm 时,势阱内电子的最大面密度 $2N_s$ 可分别达到 3.3×10^{12} 、 1.8×10^{12} 及 $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$,与前者相比有较大程度的提高.从物理上来看, δ 掺杂可以提高阱内电子面密度的原因,正如 Chico 等^[6]所指出,在调制掺杂的情况下,费米能级是由远离阱区的半导体($\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$)的导带边及杂质电离能级所决定,而与势阱的宽度、深度以及阱内电子能级等情况完全设有关系.而在 δ 掺杂情况下,费米能级是由 δ 掺杂的浓度、杂质能级、阱区附近的能带边弯曲以及阱内电子能级等自洽决定.所以对前者,在低温下掺杂浓度的增加并不会使费米能级有大的变化;但对后者,却可以有较大的变化.

4 结论

采用非均匀网格有限差分法,在有效质量近似基础上对生长在 $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}(001)$ 衬底上的势垒区 δ 掺杂的量子阱 $\text{Si}/\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ 的电子势位及电子密度分布进行了自洽计算,得到下面结果:

1. 在阱宽较小($D_w=6\text{nm}$)的情况下,对各种 δ 掺杂面密度($N_d \leq 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$),电子密度基本上都分布在势阱的中心;但当阱宽较大($D_w=9\text{nm}$)时,只有当 $N_d \leq 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时,电子密度才分布在势阱中心,当 N_d 较大时,电子密度将移向势阱两边.
2. δ 掺杂位置 D_s 并不影响电子密度的分布情况,但它决定最大的 δ 掺杂面密度阈值 $\text{Max}(N_d)$. 当掺杂面密度超过该阈值后,电子密度将不再随之增加. D_s 越大, $\text{Max}(N_d)$ 越小.
3. 势阱内电子面密度与总的 δ 掺杂面密度之比 N_s/N_d 随掺杂面密度 N_d 的增加而减小,但不管哪种情况下,绝大部分电子密度($\geq 97\%$)都分布在阱区内.
4. 势垒区 δ 掺杂量子阱的电子面密度比调制掺杂量子阱中的电子面密度可有较大幅度的提高,因而可以有效地提高低温电导率.

致谢 感谢谢希德、张开明、陆栋及王迅等教授对本工作的支持和鼓励.

参 考 文 献

- [1] L. Pfeiffer, K. W. West, H. L. Stormer *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1989, **55**:1888.
- [2] P. J. Wang, B. S. Meyerson, F. F. Fang *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1989, **55**:2333.
- [3] S. F. Nelson, K. Ismail, T. N. Jackson *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1993, **63**:794.
- [4] J. E. Cunningham, W. T. Tsang, G. Timp *et al.*, *Phys. Rev.*, 1988, **B37**:4317.
- [5] T. Y. Kuo, J. E. Cunningham, E. F. Schubert *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 1988, **64**:3324.
- [6] L. Chico, W. Jaskolski, R. Perez-Alvarez *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter*, 1993, **5**:9069.
- [7] M. E. Lazzouni, G. T. Einevoll and L. J. Sham, *J. Appl. Phys.*, 1993, **74**:2613.
- [8] J. C. Bean, *Proceeding of IEEE*, 1992, **80**:571.
- [9] J. Weber and M. I. Alonso, *Phys. Rev.*, 1989, **B40**:5683.
- [10] F. Stern and S. E. Laux, *Appl. Phys. Lett.*, 1992, **61**:1110.
- [11] L. Hedin and B. I. Lundquist, *J. Phys.*, 1971, **C4**:2064..
- [12] L. H. Tun, G. L. Snider, L. D. Chang *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 1990, **68**:4071.

Electronic Band Structures and Electronic Concentration Distributions of Quantum Wells Si/Ge_{0.3}Si_{0.7} With δ -Doping in Barriers

Xu Zhizhong

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433)

Received 16 January 1995, revised manuscript received 13 May 1995

Abstract The potential and electronic concentration distributions of quantum wells Si/Ge_{0.3}Si_{0.7} with δ -doping in barriers grown on Ge_{0.3}Si_{0.7}(001) substrates are obtained by solving the Schrodinger-Poisson equations self-consistently using the finite-difference method with a nonuniform mesh size in the frame of effective mass theory. The dependences of the geometric structure parameters-well widths, δ -doping positions and δ -doping impurity concentrations on the electronic concentration distributions in the well are discussed.

PACC: 7340L