

研究简报

关于 Ge/GaAs(110) 界面的 费米能级钉扎

徐 至 中

(复旦大学现代物理所, 上海)

1986年9月25日收到

采用饱和的平板模型及半经验的紧束缚方法计算了吸附 Ge 原子的 GaAs(110) 表面在不同覆盖度情况下的电子态密度。结合以前对 Ge/GaAs(110) 界面系统电子态的理论与实验研究工作, 提出 Ge/GaAs(110) 界面的费米能级钉扎位置主要决定于 GaAs 表面层与 Ge 吸附层之间的电子电荷转移。

主题词: Ge/GaAs 界面, 虚晶近似, 费米能级钉扎, 局域态密度, 悬挂键

Mönch 等^[1] 对 Ge/GaAs(110) 的光电子发射谱及功函数的测量指出, 在 Ge/GaAs(110) 异质结的 GaAs 一方, 费米能级钉扎在价带顶上面 0.75 eV 处, 并用 Spicer 等提出的统一缺陷模型解释了这一现象, 认为费米能级钉扎位置决定于吸附层所引起的表面缺陷的电子能级。Brugger 等^[2] 对 Ge/GaAs(110) 进行了共振拉曼散射测量, 发现当吸附层覆盖度大于六个单层时, GaAs 在界面附近的能带弯曲迅速变小。因此他们提出, 在 Ge 覆盖度小于一个单层时, 费米能级位置主要决定于由于 Ge 原子的吸附而使再构的 GaAs(110) 表面回复到理想表面后所引起的悬挂键能级以及吸附的 Ge 原子所产生的界面能级。而当吸附层超过一个单层后, 在 Ge/GaAs 界面处附近的 GaAs 带隙内不存在任何能级, 这时在 Ge 表面层附近, 费米能级钉扎在 Ge 的悬挂键能级处。徐永年等^[3] 的理论计算表明, 当吸附 Ge 原子时, 理想的 GaAs(110) 表面比弛豫的再构表面具有更低的能量, 因此他们也提出与 Brugger 等相似的看法。

我们采用半经验的紧束缚方法, 对 Ge/GaAs(110) 界面系统的电子能级进行了计算。以底面用赝 As 及赝 Ga 原子饱和的六层 GaAs(110) 面原子层(平板)模拟半无限的体 GaAs 晶体。吸附的 Ge 原子可以等几率地处在 Ga 格点或 As 格点上。当覆盖度小于一个单层时, 我们采用虚晶近似, 即把占据的格点与未被占据格点进行平均。设 Ge 覆盖度为 x , 则 Ge 原子的所有紧束缚参数都乘以 x 。我们采用 Vogl 等^[4] 的紧束缚参数, 因此只考虑最近邻原子间的互作用。对于 Ge-Ga 以及 Ge-As 间的互作用参数采用 Harrison 公式^[5] 进行估算。假设由 Harrison 公式求得的 GaAs、Ge、GaGe 以及 GeAs 的互作用参数分别为 $V^H(\text{GaAs})$ 、 $V^H(\text{Ge})$ 、 $V^H(\text{GaGe})$ 以及 $V^H(\text{GeAs})$, 则我们计算中采用的 Ga-Ge 以及 Ge-As 间的互作用参数分别由下式给出:

$$V(\text{GaGe}) = \frac{V(\text{GaAs}) + V(\text{Ge})}{V^H(\text{GaAs}) + V^H(\text{Ge})} \times V^H(\text{GaGe})$$

$$V(\text{GeAs}) = \frac{V(\text{GaAs}) + V(\text{Ge})}{V^H(\text{GaAs}) + V^H(\text{Ge})} \times V^H(\text{GeAs})$$

式中 $V(\text{GaAs})$ 及 $V(\text{Ge})$ 分别是由 Vogl 等所给出的 GaAs 及 Ge 的互作用参数。

我们的计算结果如图 1 和图 2 所示。它们分别示出了在各种不同覆盖度情况下, Ge 吸附层及 GaAs(110) 表面层的局域态密度。由图 1 可以看到, 在覆盖度 $x = 0.2 \text{ ML}$ (0.2 单原子层)时, 吸附层的态密度都局限在 -2 — $+2 \text{ eV}$ 的能量范围内。随着 Ge 覆盖度的增加, 由于 Ge 原子间的互作用加强, 使吸附层的局域态密度的能量范围逐渐扩大。而且当 $x = 1 \text{ ML}$ 时, 在 GaAs 的基本带隙区内不存在任何电子状态。在图 2 中, 我们可以看到当 $x = 0.2 \text{ ML}$ 时, 在 GaAs 的基本带隙区内存在有许多局域电子态, 这些电子态大部分是由 Ge-Ga、Ge-As 价键所引起, 但是在 1.4 eV 处的峰值是由 GaAs 表面的悬挂键所引起, 随着覆盖度的增加, 悬挂键很快得到饱和, 因而该峰也迅速变小。当 $x = 1 \text{ ML}$ 时, 在 GaAs 的基本带隙内也不存在任何电子状态。此外, 我们的计算结果还表明在 Ge/GaAs(110) 界面处, 存在有明显的偶极层, GaAs 表面层(包括后面的第二、第三层)的电子转移给 Ge 吸附层, 使前者带正电荷而后者带负电荷, 形成电场方向向外的偶极层。

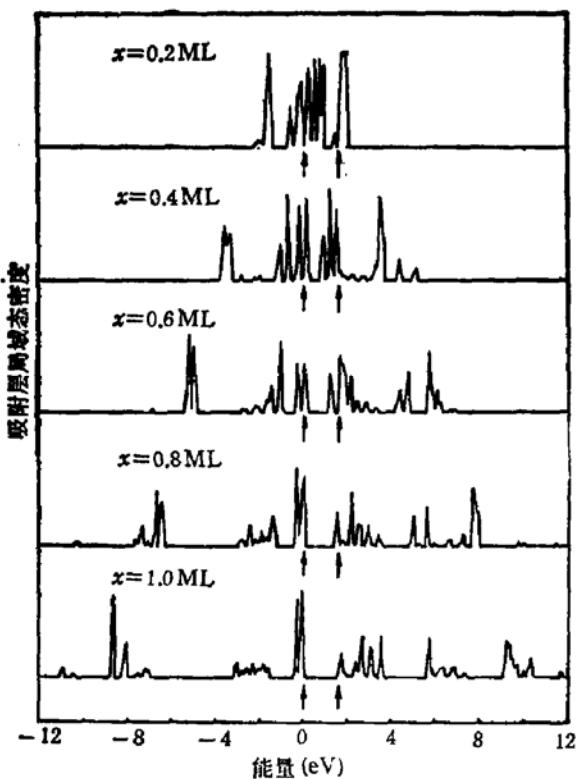


图 1 在各种不同覆盖度情况下, GaAs(110) 表面 Ge 吸附层的局域态密度

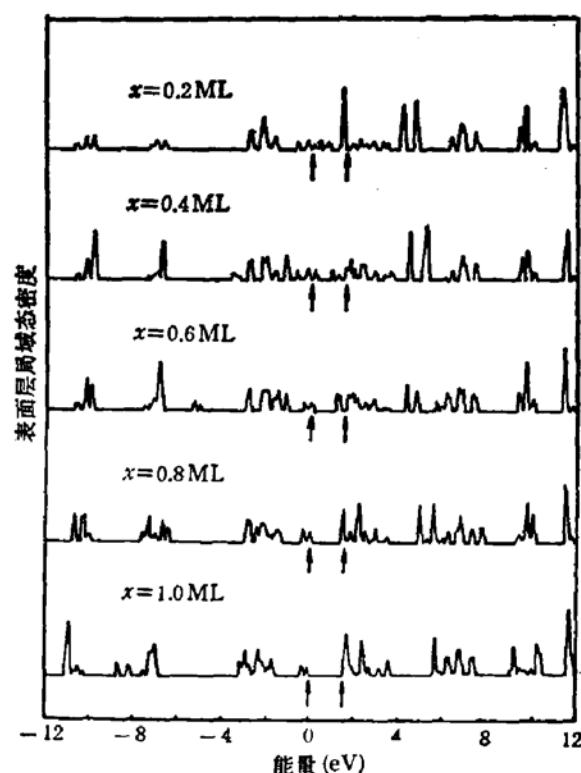


图 2 在 Ge 吸附层的各种不同覆盖度情况下, GaAs(110) 表面层的局域态密度

Pickett 等^[6]采用自洽赝势方法, 以 9 个 Ge(110) 原子层以及 9 个 GaAs 原子层组成的大原胞对 Ge/GaAs(110) 界面系统的电子态进行了计算, 其结果也表明在 Ge/GaAs(110) 界面处, GaAs 基本带隙区内不存在任何界面态。Zurch 等^[7]采用 PARUPS(偏振角分

辨紫外光电子谱)技术测量了 GaAs(110) 表面覆盖有 0.5 ML Ge 时的界面电子态, 在 GaAs 的基本带隙区内也没有测量到任何由 Ge 原子的吸附所引起的附加电子态。Merlin 等^[4]在对由 n 型 Ge 与 n 型 GaAs 所构成的异质结作光的非弹性共振散射实验时, 测量到由处在界面附近的 Ge 积累层中的准二维电子能级间的跃迁所产生的谱线。因此可以推论在 Ge/GaAs 界面处不应存在有使费米能级发生钉扎的界面态^[2]。实际上, 如图 3 所示, 在 Ge/GaAs 界面处, 费米能级是由界面处电子的重新分布所决定。

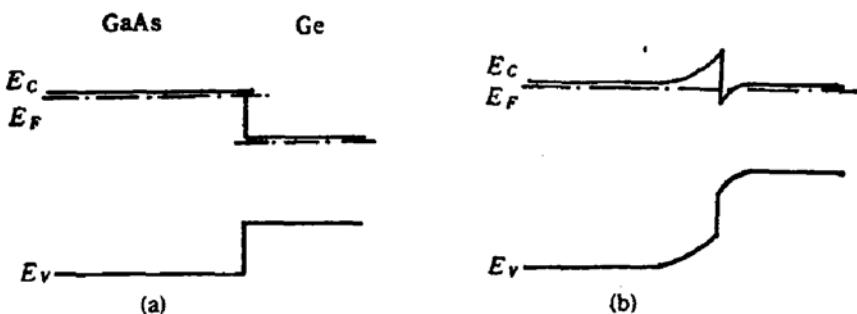


图 3 Ge/GaAs 异质结界面能带图。(a) 电子重新分布前的情况。
(b) 电子重新分布后达到平衡时的情况

根据前面的讨论, 我们认为当 Ge 原子开始吸附时, 原来再构的 GaAs(110) 表面由于 Ge 原子的吸附而回复到理想表面, 因而使基本带隙内产生悬挂键能级, 但是随着 Ge 原子覆盖度的增加, 悬挂键很快得到饱和, 当覆盖度 $x \geq 1\text{ML}$ 时, 在 Ge/GaAs(110) 界面处, GaAs 的基本带隙内不存在任何界面态, 这时费米能级位置主要决定于 GaAs 表面层与 Ge 吸附层间的电子电荷转移, 也即偶极矩的形成使 GaAs 表面能带发生弯曲。随着吸附层厚度的继续增加, 当形成典型的异质结时, 这时界面处的费米能级就由如图 3 所示的电子在界面处的重新分布所决定。

参 考 文 献

- [1] W. Mönch, S. Bauer, H. Gant and R. Murchall, *J. Vac. Sci. Technol.*, 21, 498 (1982). W. Mönch, H. Gant, *Phys. Rev. Lett.*, 48, 515 (1982).
- [2] H. Brugger, F. Schüffer and G. Abstreiter, *Phys. Rev. Lett.*, 52, 141 (1984).
- [3] Xu Yongnian, Zhang K. M. and Xie X. D., *Commun. in theor. Phys. (Beijing, China)*, 3, 269 (1984).
- [4] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solid.*, 44, 365 (1983).
- [5] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*. (W. H. Freeman and Company, 1980).
- [6] W. E. Pickett, S. G. Louie and M. L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.*, 39, 109 (1977); *Phys. Rev.*, B17, 815 (1978).
- [7] P. Zurcher, G. J. Lapeyre, J. Anderson and D. Frankel, *J. Vac. Sci. Technol.*, 21, 476 (1982).
- [8] R. Merlin, A. Pinczuk, W. T. Beard and C. E. E. Wood, *J. Vac. Sci. Technol.*, 21, 516 (1982).

On the Fermi Level Pinning at Ge/GaAs(110) Interface

Xu Zhizhong

(*Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai*)

Abstract

By semi-empirical TB method and saturated slab model, the electronic states on the GaAs(110) surface adsorbed by Ge atoms in different coverages have been calculated. Combining with previous theoretical and experimental studies, an idea on the problem of Fermi level pinning on the Ge/GaAs(110) interface is suggested.

KEYWORDS Ge/GaAs interface, Virtual crystal approximation, Fermi level pinning, Local state density, Dangling bond