

# 导纳谱研究锗硅单量子阱的退火效应\*

柯 炼 林 峰 张胜坤 谏达宇 陆 王 迅

(复旦大学应用表面物理国家重点实验室 上海 200433)

**摘要** 利用导纳谱研究了锗硅单量子阱的热稳定性。导纳谱热发射模型的理论模拟和深能级缺陷研究表明: 在 900 K 以下退火 10 分钟, 晶格弛豫并不明显, 但原子的互扩散引起量子阱中子能级严重降低。同时, 我们计算出了原子的互扩散系数, 以及单量子阱  $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}/\text{Si}$  中原子互扩散的热激活能 1.08eV。

**PACC:** 0750, 6822, 0365, 7340L

## 1 引言

由于应变以及锗的组分都能改变锗硅合金层的能带结构, 所以应变的锗硅量子阱在微电子和光电子器件方面具有广阔的应用前景<sup>[1]</sup>。然而, 量子阱的热稳定性是材料生长和器件制备时所遇到的一个重要问题。在高温环境下, 异质结界面成分的互扩散将影响界面的陡峭性; 应变弛豫将引入位错缺陷。在一定条件下, 这两大因素互相联系, 增加了对其进行研究的难度。

X 射线<sup>[2,3]</sup>, 卢瑟福背散射<sup>[4,5]</sup>以及 RAMAN 光谱<sup>[6]</sup>都是研究此系统热稳定性的良好手段。但是, 它们需要样品的结构是超晶格或异质结。这与器件应用中所感兴趣的单量子阱结构还存在一定的差别。由于此体系为间接带隙, 用 PL 谱来研究单量子阱结构的热稳定性<sup>[7,8]</sup>要求晶体的质量较高和测试温度较低。八十年代后期, Lang 等人将导纳谱移植于半导体锗硅异质结能带偏移的测量<sup>[9]</sup>。在本文中, 我们首次用导纳谱的载流子热发射模型<sup>[10]</sup>来研究单量子阱的退火效应, 发现了扩散引起重空穴基态子能级变小, 子能级上空穴浓度减小。根据子能级上空穴的激活能, 我们估算出了扩散系数以及其热激活能。

## 2 测试原理

在零偏压条件下, 量子阱靠近肖特基势垒区, 耗尽区势垒将由量子阱势垒和肖特基势垒共同形成。当测试的交流信号频率较高, 并且温度较低时, 阱中空穴浓度的变化将跟不上高频测试信号的变化。此时, 越过势垒的空穴由阱中子能级上空穴的发射频率决定。由热发射模型<sup>[10]</sup>, 样品的交流电导  $G$  和电容  $C$  为:

\* 本课题得到国家自然科学基金部分资助

柯 炼 复旦大学物理系凝聚态物理硕士

王 迅 博士生导师, 复旦大学应用物理国家重点实验室教授

1997-06-02 收到, 1997-07-27 定稿

$$G = \frac{e_p \omega^2}{e_p^2 + \omega^2} \beta \quad (1)$$

$$C = \frac{e_p^2}{e_p^2 + \omega^2} \beta + C_0 \quad (2)$$

其中  $\beta$  是与阱中子能级上空穴浓度有关的参数;  $\omega$  为测试频率;  $C_0$  是低温时的电容, 由于低温时量子阱中的空穴几乎被“冻结”住,  $C_0$  主要是肖特基势垒电容  $e_p$  是量子阱中子能级上空穴的发射率, 从阱中载流子的发射和俘获间的细致平衡关系推导出<sup>[11]</sup>:

$$e_p = \alpha T^{1/2} \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (3)$$

其中  $E_a$  为激活能, 对应于基态子能级至势垒的能级差;  $\alpha$  是与温度  $T$  无关的常数,  $k$  为玻尔兹曼常数 在低温端  $e_p \rightarrow 0$  时, 电导  $G \rightarrow 0$ , 电容  $C \rightarrow C_0$ ; 在高温端  $e_p \gg \omega$  时, 电导  $G \rightarrow \beta$ , 电容  $C \rightarrow C_0 + \beta$  如果把电容和电导视为温度的函数,  $C-T$  曲线上会出现平台,  $G-T$  曲线上会出现峰值 在导纳谱的峰值处,

$$\frac{G_{\max}}{\omega} = \frac{\beta}{2} = \frac{C_h - C_l}{2} = \frac{\Delta C}{2} \quad (4)$$

$$\omega = e_p(T_m) = \alpha T_m^{1/2} \exp\left(-\frac{E_a}{kT_m}\right) \quad (5)$$

### 3 实验结果与讨论

#### 3.1 样品生长及处理

A、B 样品是用分子束外延方法在电阻率为  $0.01 \Omega \cdot \text{cm}$  的 P 型 Si(100) 衬底上生长的单量子阱, 生长温度为  $550^\circ\text{C}$ , 缓冲层硅层厚度为  $200 \sim 250 \text{nm}$ , 盖帽硅层厚度为  $300 \text{nm}$ . A 样品的阱宽为  $15 \text{nm}$ , 阱中 Ge 的组分为  $0.25$ , B 样品的阱宽为  $7 \text{nm}$ , 阱中 Ge 的组分为  $0.3$ . A 样品分割成小片后放于预热的石英舟上, 然后被迅速推入有氮气保护的管状退火炉中进行一次性退火, 退火时间为  $10$  分钟, 退火温度分别为  $700$ 、 $800$  和  $900^\circ\text{C}$ ; B 样品分割成小片后, 恒温  $900^\circ\text{C}$ , 进行  $10$ 、 $20$ 、 $30$  和  $40$  分钟退火 未退火和退火后的样品背面蒸铝形成欧姆接触, 正面蒸铝形成肖特基接触

#### 3.2 导纳谱测试

图 1 是不加偏压时未退火 B 样品在不同测试频率下的导纳谱和  $C-T$  谱 在低温和高温端, 电容曲线出现平台 随着测试频率提高, 导纳谱的峰位向高温端移动 这是由于在高频条件下, 量子阱中子能级上的空穴需要更高的温度才能满足向外的发射率  $e_p(T_m)$ . 但是, 导纳谱的峰高在不同测试频率下基本相等, 且近似等于高温端电容与低温端电容差的一半 根据 (5) 式, 我们从  $\ln(\omega/T_m^{1/2}) - (1/T_m)$  图可以得到阱中空穴的激活能 实验测得未退火 A、B 样品的激活能分别为  $0.205 \text{eV}$ 、 $0.232 \text{eV}$  (见图 2). 用有限深方势阱模型来模拟价带势能的形状, 通过求解薛定谔方程, 未退火 A 样品基态重空穴的激活能为  $0.207 \text{eV}$ , 轻空穴的激活能为  $0.201 \text{eV}$ , 未退火 B 样品基态重空穴的激活能为  $0.239 \text{eV}$ , 轻空穴的激活能为  $0.218 \text{eV}$ . 这说明空穴主要是从基态重空穴上发射的 理论值与实验值的相对偏差在  $2.5\%$  之内, 这说明理论模型是正确的 这里我们参考了价带偏移  $\Delta V = 0.84x \text{eV}$ ,  $x$  为锗的组分, 空穴的有效质量为  $m(x) = m_{\text{Si}}(1-x) + m_{\text{Ge}}x$ . 硅锗重空穴的有效质量分别为  $0.5m_0$ 、 $0.3m_0$ ; 硅锗轻空穴的有效质量分别为  $0.16m_0$ 、 $0.044m_0$ ,  $m_0$  为电子的有效质量

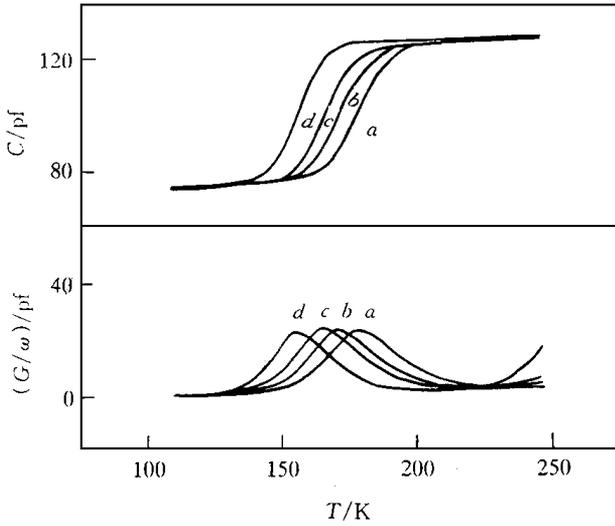


图 1 未退火单量子阱 B 样品的导纳谱及 C-T 谱  
阱中锗的组分为  $x = 0.3$ , 阱宽为  $L_w = 7\text{nm}$ ,  
测试频率 a: 1MHz, b: 500kHz, c: 300kHz, d: 100kHz

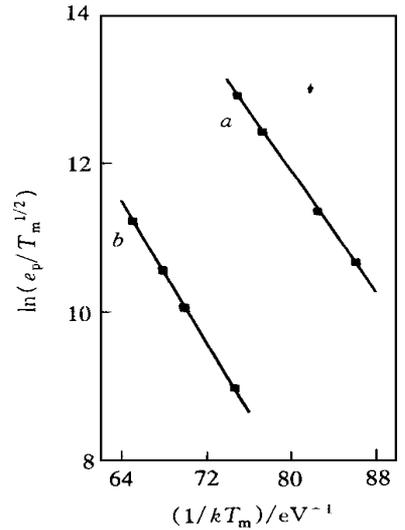


图 2 a: 未退火单量子阱 A 样品的激活能为 0.205eV; b: 未退火单量子阱 B 样品的激活能为 0.232eV

### 3.3 退火后晶体的质量

在高温退火过程中, 应变弛豫和扩散都可能发生 而实际退火过程中, 应变弛豫量取决于退火时间、退火温度以及未退火样品中晶格共格的好坏 如果退火时间短, 退火温度低, 合金层中晶格共格得好, 应变弛豫量就小 应变弛豫会引入位错缺陷, 降低晶体的质量, 而缺陷深能级上的空穴发射将使导纳谱的理论曲线与实验曲线不符

图 3 和图 4 分别是未退火和恒温 900 退火 10 分钟后 B 样品的导纳谱和 C-T 谱实验

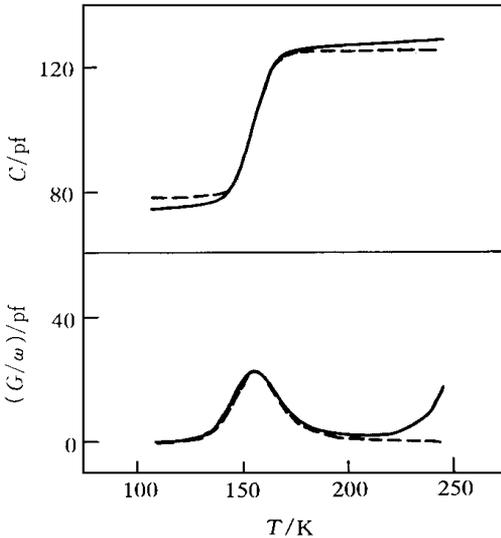


图 3 未退火单量子阱 B 样品的导纳谱及 C-T 谱  
测试频率为 100kHz,  
实线为实验曲线, 虚线为模拟曲线

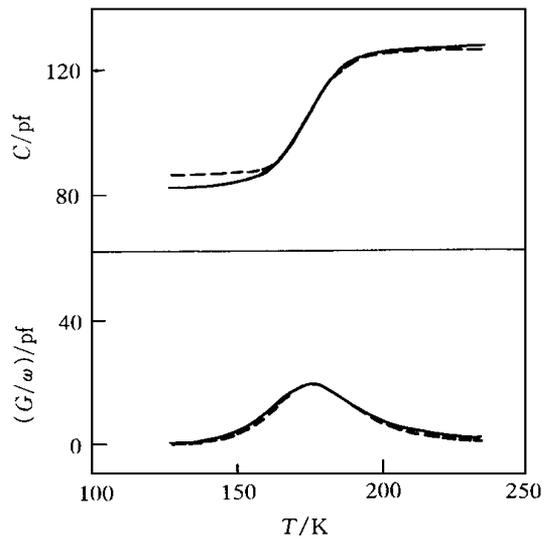


图 4 恒温 900 退火 10 分钟后 B 样品的导纳谱及 C-T 谱  
测试频率为 1MHz, 实线为实验曲线, 虚线为模拟曲线

曲线和模拟曲线 在所感兴趣的温度范围内, 理论曲线与实验曲线符合得很好. 这说明退火后样品的质量还是相当好的. 由于肖特基势垒电容受温度的影响,  $C-T$  谱的理论曲线与实验曲线在低温端和高温端存在细微的差异. 肖特基势垒的漏电流随温度升高而变大, 故在高温端, 导纳谱的理论曲线与实验曲线存在较大的差别.

我们用深能级瞬态谱也没有发现位错缺陷深能级上的空穴发射. 因此, 我们认为应变弛豫量很小, 可忽略其影响.

### 3.4 扩散效应

量子阱界面处 Ge 和 Si 原子的互扩散使合金层中锗的组分变小, 量子阱的阱深减小, 阱中子能级上空穴的激活能随之减小. A 样品恒温 700、800 和 900 退火 10 分钟后的激活能分别为 0.193、0.149 和 0.130 eV; B 样品恒温 900, 退火 10、20、30 分钟和 40 分钟后的激活能分别为 0.217、0.202、0.190 和 0.182 eV.

图 5 是未退火和退火处理后的 A 样品在同一测试频率条件下的导纳谱. 随着退火温度升高, 锗原子和硅原子的互扩散系数增大, 阱中锗的组分变小, 再加上阱变宽, 子能级上空穴的激活能要减小, 所以导纳谱的峰位向低温端移动. 我们从图 4 中还可以看到导纳谱的峰高随退火温度升高而降低. 这是由于退火后量子阱对空穴的束缚效应减弱, 所以子能级上空穴的浓度减小. 我们由 (4) 式可知导纳谱的峰高会随子能级上空穴的浓度减小而降低.

在同一退火温度条件下, 退火时间延长, 阱中锗的组分减小, 子能级上空穴的激活能以及空穴的浓度都会减小, 因此, 图 6 与图 5 有相同的变化趋势.

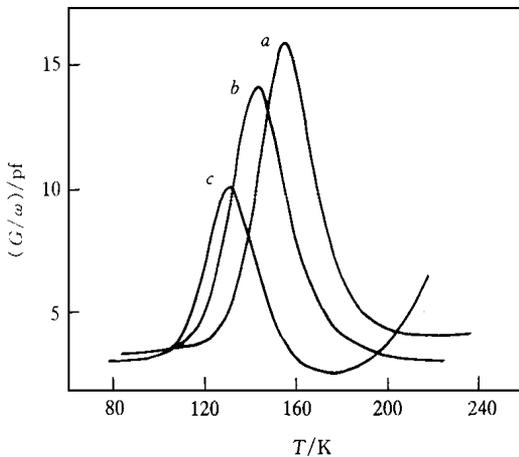


图 5 在测试频率为 5 MHz, 退火时间为 10 分钟条件下, 不同退火温度 A 样品的导纳谱. A 样品的阱宽  $L_w = 15 \text{ nm}$ , 锗的组分  $x = 0.25$ , a: 未退火, b: 700 退火, c: 900 退火.

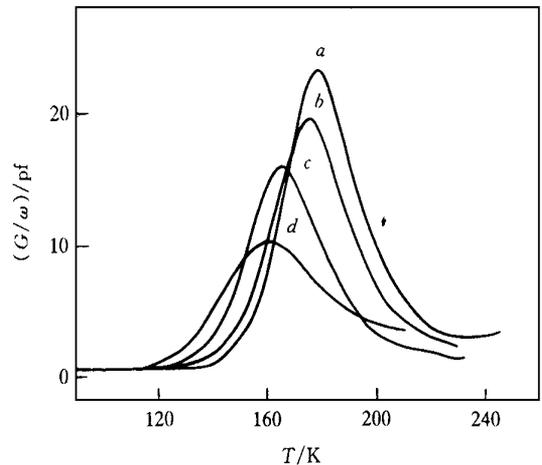


图 6 恒温 900 退火不同时间后 B 样品的导纳谱. 测试频率为 1 MHz, a: 未退火, b: 退火 10 分钟, c: 退火 20 分钟, d: 退火 40 分钟.

### 3.5 拟合扩散系数及其热激活能

锗原子和硅原子的互扩散系数随温度的变化满足关系:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \quad (6)$$

式中  $D_0$  为温度无穷大时扩散系数的表观值;  $E_g$  为原子互扩散过程中的热激活能. 为了计

算的简便,我们假设量子阱界面处的扩散各向均匀,扩散系数与锗的组分无关.我们首先设定扩散系数的初始值,由未退火样品中锗组分的分布,通过求解一维扩散方程

$$n(z, t + \Delta t) = n(z, t) + D \{n(z + \Delta z, t) + n(z - \Delta z, t) - 2n(z, t)\} \Delta t / (\Delta z)^2 \quad (7)$$

可得扩散后锗组分的分布  $n$  为锗组分;  $\Delta t$  取 1 秒;  $z$  为生长方向;  $\Delta z$  取原子量级.然后,我们求解一维薛定谔方程得扩散后基态重空穴的激活能,比较理论值与实验值,逐步修改扩散系数,最终使理论值与实验值的误差在 1meV 之内

我们从图 7 中可发现,随着退火时间的延长,B 样品的扩散系数逐渐降低.这说明合金层中锗的组分对扩散系数有较大的影响.因为应变弛豫和扩散都能降低子能级上空穴的激活能,如果忽略应变弛豫的影响,扩散就会被夸大,拟合出的扩散系数应比实际的大.而实际上,随着退火时间的延长,阱中锗的平均组分会降低,扩散系数因此而减小.

为了减小应变弛豫和锗组分变化的影响,我们选取退火时间 10 分钟,退火温度 700~900,从图 8 中得到 A 样品扩散系数的热激活能 1.08eV.有文献报道,扩散系数的热激活能为 2~5eV<sup>[2,4,5]</sup>,也有报道为 0.5~1.5eV<sup>[3]</sup>.比较他们样品中锗的组分,我们可以发现,虽然有例外,但总的趋势是如果锗的组分小,扩散系数的热激活能就大.

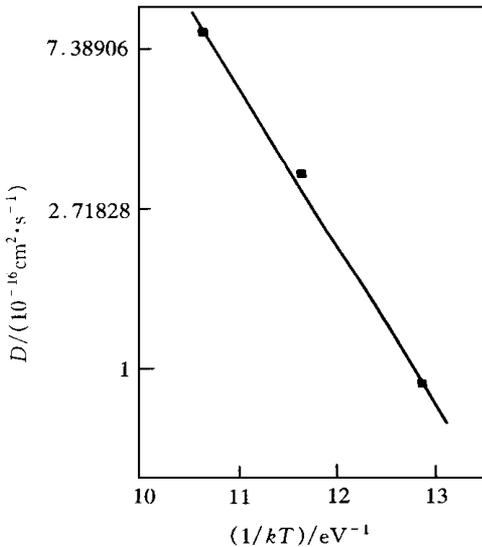


图 7 B 样品的扩散系数随退火时间的变化

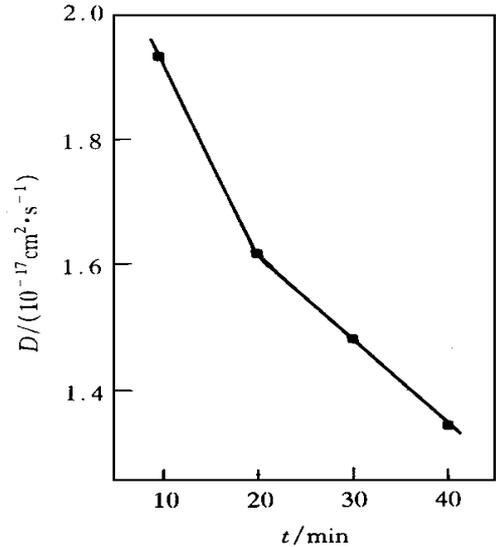


图 8 A 样品的扩散系数随温度的变化关系  
A 样品扩散系数的热激活能为 1.08eV.

#### 4 总结

(1) 我们从导纳谱热发射模型的理论模拟和深能级瞬态谱实验结果发现,900 以下退火 10 分钟的样品没有明显的应变弛豫

(2) 在 900 以下退火 10 分钟,由于原子的互扩散以及量子阱界面展宽,子能级上空穴的激活能变小,量子阱的束缚效应减弱,阱中空穴浓度降低

(3) 在 900 以下退火 40 分钟,我们还发现合金层中锗的组分变小,扩散系数变小

(4) 根据不同退火温度的扩散系数,我们求得锗组分为 0.25,阱宽 15nm 的单量子阱中原子的互扩散系数及其热激活能 1.08eV.

致谢 非常感谢王杰老师, 靳彩霞, 凌震同学在工作过程中给予的帮助

## 参 考 文 献

- [ 1 ] P. A. Soref, Proc. IEEE, 1993, **81**: 1687.
- [ 2 ] S. J. Chang, K. L. Wang, R. C. Bowman *et al.*, Appl Phys Lett, 1989, **54**(13): 1253.
- [ 3 ] J. M. Baribeau, R. Pascual and S. Saimoto, Appl Phys Lett, 1990, **57**(15): 1502.
- [ 4 ] B. Hollander, R. Butz and S. Mantl, Phys Rev, 1992, **B46**: 6975.
- [ 5 ] M. L. Green, B. E. Weir, D. Brasen *et al.*, J. Appl Phys, 1991, **69**(2): 745.
- [ 6 ] 刘晓晗, 黄大鸣, 王东红, 等, 半导体学报, 1996, **17**: 552.
- [ 7 ] H. Sunamura, S. Fukatsu, N. U. sami *et al.*, Appl Phys Lett, 1993, **63**(12): 1651.
- [ 8 ] Hiroshi Sunamura, Susnn Fukatsu, Noritaka U. sami *et al.*, Jpn. J. Appl Phys, 1994, **33**: 2344.
- [ 9 ] D. V. Lang, M. B. Panish, F. Capasso *et al.*, Appl Phys Lett, 1987, **50**: 736.
- [ 10 ] F. Lu, J. Jiang, H. Sun *et al.*, Phys Rev, 1995, **B51**: 4213.
- [ 11 ] N. Debber, D. Biswas and P. Bhattacharya, Phys Rev, 1989, **B40**: 1058.

## Annealing Effects of Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si Single Quantum Wells Studied by Admittance Spectroscopy

Ke Lian, Lin Feng, Zhang Shengkun, Chen Dayu, Lu Fang and Wang Xun

(Physics Department, Fudan University and State Lab of Applied Surface Physics, Shanghai 200433)

Received 2 June 1997, revised manuscript received 27 July 1997

**Abstract** The structural thermal stability of Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si single quantum wells has been investigated by admittance spectroscopy. The thermal emitting model curve of admittance spectroscopy and the experimental results of deep-level transient spectroscopy suggest that the strain relaxation is not obvious under the condition of 900–10 minutes thermal annealing. However, the subband sharply decreases due to the atom interdiffusion. The experimental results also show that the activation energy is 1.08eV, which associates with interdiffusion in Si/Si<sub>0.75</sub>Ge<sub>0.25</sub>/Si quantum well.

**PACC:** 0750, 6822, 0365, 7340L