

几种掺杂浓度的 GaAs 表面 Si- δ 掺杂结构研究*

刘兴权 陆 卫 陈效双 乔怡敏 史国良 沈学础

(中国科学院上海技术物理所 红外物理国家实验室 上海 200083)

摘要 本文利用了光调制光谱(PR), 原位测量了 GaAs(001) 表面 Si- δ 掺杂结构样品, 研究了不同掺杂浓度对 Si- δ 掺杂相关的光谱结构的影响, 观察到了 Si- δ 掺杂结构中, 价带连续态到导带半 V-形势阱中子带的跃迁, 观察到该跃迁相随掺杂浓度增加先向高能移动, 而后达到饱和. 用简单的三角势模型, 在理论上计算了面掺杂浓度 $2.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 时, 半 V-形势阱中子带的能级位置, 波函数的分布及光吸收系数, 与实验结果相一致.

PACC: 7340L

1 引言

光调制反射光谱(PR)在检测半导体材料电子态方面有广泛的应用^[1-3], 与其它光谱方法相比, PR 在室温条件下具有高灵敏度, 高分辨率等优点, 同时, 对样品又是非接触式, 不造成任何损坏, 比通常的电调制方法又有很大的优越性; 因此成为一种检测半导体近表面电子态灵敏的方法.

对 GaAs 材料体内的 Si- δ 掺杂及类似的结构^[4-6], 人们已经进行了大量的光学和电学方面的研究, 而其中, PR 是一个很重要的方法. 通常的 GaAs 中的 Si- δ 掺杂样品是在 Si 面掺杂后长上一层非掺杂的覆盖层. 由于表面处表面态的存在, F_{em1} 能级是钉扎在近带隙中间的, 而在面掺杂层附近, F_{em1} 能级是在导带底附近的, 在表面与 Si- δ 层之间, 存在均匀的电场; 同时, 由于电子向衬底方向的扩散, 在 Si- δ 掺杂层附近, 形成一个 V 形势阱, 阱中因束缚效应会形成量子化的子能级. 对于这样的样品, 由于覆盖层的存在, PR 谱测量中, 在高于带隙端, 将出现 Frenkel-Keldysh 振荡(FKO s)^[7], 这种 FKO s 将使有覆盖层的 Si- δ 掺杂相关的结构变得不可分辨, 使问题简化的一种途径是, 利用 PR 系统与 MBE 系统结

* 国家自然科学基金资助项目

刘兴权 男, 1967 年出生, 博士生, 从事 III-V 族化合物半导体材料分子束外延工作
陆 卫 男, 1962 年出生, 研究员, 博士生导师, 从事半导体材料与器件物理研究
1996-12-16 收到, 1997-03-21 定稿

合的原位检测技术, 改变 Si-δ 掺杂结构, 不长覆盖层, 从而消除来自覆盖层的影响, 这就是本文报道的对几种掺杂浓度下表面 Si-δ 掺杂的研究

2 实验与结果

样品是在 RBER 32P R&D MBE 系统上生长的, 经过预处理后的 GaAs(001) 半绝缘的衬底装入后, 在 600 °C 下脱氧化膜, 然后再生长 500nm 的缓冲层, 降温到 520 °C 下进行

Si-δ 表面掺杂, 生长后样品传到预处理室, 进行 PR 测量, 其中, 我们用 He-Ne 激光作为调制光, 探测光源为溴钨灯, 探测器为 Si 光电二极管, 探测器信号经过 Eg&G Model 5206 型锁相放大器放大后计算机将数据存到文件中

实验的结果如图 1 所示 对图中的跃迁能量位置进行 Lorentz 线形拟合; 我们知道, 调制光谱中的反射率的变化与介电函数的变化有关,

$$\Delta R/R = \alpha \Delta \epsilon + \beta \Delta \epsilon'$$

式中 R 为反射率; $\Delta \epsilon, \Delta \epsilon'$ 为介电函数 $\epsilon = \epsilon' + i\epsilon''$ 的微分变化量; α, β 为 Seraphina 系数 由上式, 用 Aspinnes 的微分公式, 把 $\Delta R/R$ 写成光子能量的函数:

$$\Delta R/R = \text{Re} \left(\sum_{k=1}^p C_k e^{i\theta_k} (h\nu - E_{g,k} + i\Gamma_k)^{-n_k} \right)$$

其中 $h\nu$ 是光子能量; p 是光谱结构数; C_k 为振幅; θ_k 为第 k 个结构的位相角; $E_{g,k}$ 为第 k 个结构的临界点处的能量值; Γ_k 为第 k 个结构的展宽因子; n_k 为第 k 个结构临界点的类型和微分的级次 我们采用双峰同时拟合, 拟合的结果如表 1 所示

表 1

	A	B	C	D	E	F
E_{g0}/eV	1.415	1.413	1.412	1.411	1.412	1.411
E_{g1}/eV		1.421	1.422	1.428	1.432	1.431

表中 E_{g0} 为 GaAs 带间能量, E_{g1} 为与 Si-δ 结构相关的跃迁能量

从图 1 中可以看到: 1. FK 振荡消失, 结构清楚; 2. GaAs 带间跃迁能量掺杂后向低能方向移动; 3. Si-δ 掺杂相关的结构跃迁随掺杂浓度的提高而先向高能方向移动, 而后达到饱和, 如图 2 所示 为图示清楚, 纵坐标是同时减掉 1.4eV; 横坐标是掺杂浓度, 实线是实验点的连接

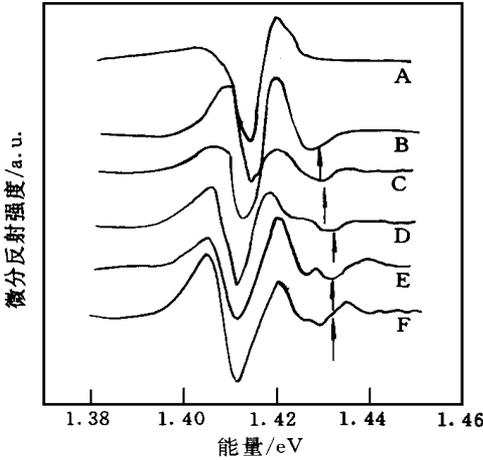


图 1 不同掺杂浓度样品 PR 谱

样品 A 为纯 GaAs, B 为 $3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, C 为 $6.3 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$, D 为 $2.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$, E 为 $3.6 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$, F 为 $4.8 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$; 箭头表示与 Si-δ 掺杂有关的跃迁能量

3 实验结果讨论

对于 Si-δ 掺杂结构, FK 振荡来自于掺杂层与表面间的覆盖层, 我们的结构没有覆盖层, 因此, FK 振荡消失, 结构变得十分清楚, 只有 GaAs 的带间跃迁与其附近的与 Si-δ 掺杂相关的结构 Si-δ 表面掺杂后, 使得电离的电子向衬底方向扩散, 从而形成内建电场, 在掺杂层附近, 形成了一个与真空能级结合的半 V 形势阱, 同时阱中因量子限制效应而形成分立的子能级, 因为内建电场的形成, 电场效应使得 GaAs 带间跃迁 E_{g0} 向低能方向移动 (这里没有给出定量的计算结果), 而价带连续态到导带半 V 形势阱中子带的跃迁, 在带间跃迁的高能端 E_{g1} 处出现结构, 随掺杂浓度的提高, 载流子密度不断的提高, 因此, 掺杂层附近的半 V 形势阱变深, 同时阱宽度也变化, 使得阱中的量子限制效应加强, 跃迁能量 E_{g1} 随掺杂浓度的增加向高能移动主要是由于子能级的上移造成的

我们采用简单的三角势近似, 如图 3 所示模型 E_{g1} 代表价带连续态到导带第一子带跃迁, E_{g0} 代表 GaAs 带间跃迁, E_c 和 E_v 分别代表价带和导带. 采用 Airy 函数, 去计算其子带结构和波函数, 在真空侧, 我们用无限高垒代替, 使问题简化, 这种价带连续态到导带 V 形势阱中子能级的跃迁的吸收系数为:

$$\alpha = \frac{1}{h\nu_s} \alpha = \frac{1}{h\nu_{s,v}} \alpha_{s,v}$$

其中 $\alpha_{s,v}$ 由下式给出:

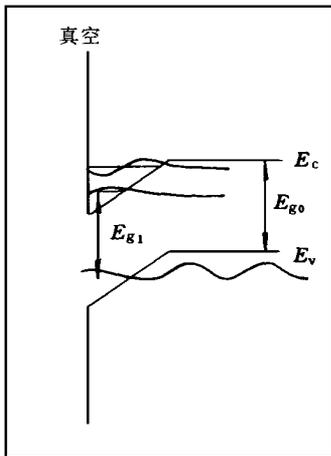


图 3 理论模型与 $2.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 浓度下计算的波函数分布示意图

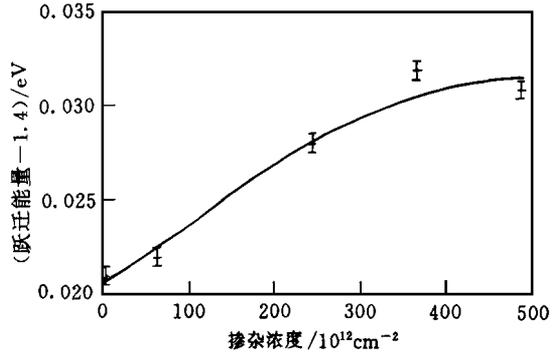


图 2 不同掺杂浓度下价带连续态到导带子带跃迁能量

$$\alpha_{s,v} = \sum_k | \langle v | s \rangle |^2 | \vec{\epsilon} \cdot \vec{P} |^2 \delta(E_s(k) - E_v(k) - h\nu)$$

这里 k 是波矢 k 中平行表面的分量, 求和是对未被占据的能级求和, 也就是对 $E_s > E_f$ 的态的求和; $\langle v | s \rangle$ 是价带连续态与导带子带态间的交叠积分; \vec{P} 是动量算符矩阵元; $\vec{\epsilon}$ 是入射光的极化矢量. 在计算中所用到的参数参考了文献 [8] 中的参数. 经过计算后, 我们得到, 在掺杂浓度为 $2.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 下, Si-δ 掺杂相关的跃迁能量位置在 1.430 eV, 而实验值为 1.429 eV, 与实验结果吻合得很好, 算得的波函数如图 3 所示. 图 2 给出不同掺杂浓度下价带连续态到导带子带跃迁能量, 从图 2 我们可以看出, 随掺杂浓度的增大, 开始时跃迁能量几乎是线性增大, 到浓度达到 $2.4 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 时, 能量差开始不动. STM 研究表明^[9], 当表面 Si 掺杂浓度达到一定程度时, 沿 GaAs 表面 (2×4) 再构的 As 空列, Si 原子倾向于互相结合成为 Si 的 Kinks, 而这种 Si 的

Kinks 表现为一种受主。当掺杂浓度达到一定程度, Kinks 的表面密度与充当施主的 Si 原子浓度相等, 则增加的 Si 原子并没有提供更多的载流子, 在光谱上表现为跃迁能量不变。进一步的理论工作将用自洽势来计算。

4 结 论

利用光调制光谱 (PR) 与分子束外延系统结合的原位检测的手段, 研究了面掺杂浓度对价带连续态到导带子带跃迁的影响, 在理论上, 用简单的三角势近似, 计算了跃迁的能量位置, 及波函数的分布, 与实验结果吻合的很好。

参 考 文 献

- [1] J. L. Shay, Phys Rev. B, 1970, **2**: 803~ 806
- [2] H. Shen, X. C. Shen, F. H. Pollak *et al* , Phys Rev. B, 1987, **36**: 3487.
- [3] W. M. Theis, G. D. Sanders, C. E. Leak *et al* , Phys Rev. B, 1989, **37**: 3042~ 3045
- [4] H. Shen, Z. Hang, S. H. Pan *et al* , Appl Phys Lett , 1988, **52**: 2058~ 2060
- [5] X. Yin, H. M. Chen, F. H. Pollak *et al* , J. Vac. Sci. Technol. A, 1992, **10**: 11~ 14
- [6] H. Shen, M. Butta, L. Fotiadis *et al* , Appl Phys Lett , 1990, **57**: 2118~ 2120
- [7] C. V. Hoog, K. Denette, J. D. Boek *et al* , Appl Phys Lett , 1989, **54**: 608~ 610
- [8] M. D. Pashley and K. W. Haberern, Phys Rev. Lett , 1991, **67**: 2697~ 2700
- [9] A. Zemmer, F. Koch and K. Ploog, Surf. Sci. , 1988, **196**: 671~ 674

Doping Concentration Effect of Si Surface Delta Doping on GaAs(001) Surface

Liu Xingquan, Lu Wei, Chen Xiaoshuang, Qiao Yimin, Shi Guoliang and S. C. SHEN

(National Laboratory for Infrared Physics, The Chinese Academy of Science, Shanghai 200083)

(Shanghai Institute of Technical Physics, The Chinese Academy of Science, Shanghai 200083)

Received 16 December 1996, revised manuscript received 21 March 1997

Abstract Combining photoreflectance (PR) system with MBE, we study the surface Si δ doping effects on GaAs(001) surface. Compared with the conventional Si δ doping sample, these surface δ doping samples can get rid of Franz-Keldysh oscillations (FKOs). We have observed that the transition energy of Si δ doping related spectral structure shifts first to higher energy and then keeps constant with increasing the doping concentration, and the GaAs fundamental transitions shift to lower energy in comparison with pure GaAs. We use a simple model to calculate the transition energy and the wavefunction. The results are in good agreement with experimental results.

PACC: 7340L