

# 应变层结构和新半导体器件

郭宝增

(河北大学电子系, 保定 071002)

本文介绍了应变层结构的原理及其在半导体器件中的应用。由于轴应变使应变层结构的价带空穴表现出多样的特性, 本文详细讨论了应变层量子阱的电子结构, 着重指出了价带工程的可能应用。并介绍了高空穴迁移率晶体管、低阈值激光管等新器件的研制情况, 以及几种典型的应变层结构材料。

由于分子束外延技术的应用, 使得异质外延技术获得了相当大的成功, 导致了量子阱和超晶格结构的出现。异质外延层按衬底和外延层两种材料的晶格常数是否近似相等可以分为两类: (1) 两种材料晶格常数基本相同的晶格匹配结构。这类结构界面比较理想, 在器件的制造中获得广泛的应用。(2) 两种材料晶格常数不同的非匹配结构。由于晶格常数不同, 在外延层与衬底的接触面附近, 外延层会受到与界面平行的双轴的压缩或伸张的应力, 因而这种结构容易在界面引入失配位错。然而近年来由于分子束外延技术的发展, 在外延层厚小于某一临界值的条件下, 已经能够生长出高质量的外延层, 这类结构称为应变层结构。应变层结构具有一些新的特点。由于外延层在界面附近所受的应力, 导致外延层的能带发生变化, 一般说应力对导带的影响较小, 而对价带却产生较大的影响, 因而出现一些有趣的物理效应, 如空穴有效质量下降, 迁移率增加等, 根据这些效应可以制造高空穴迁移率晶体管等新的器件。这种导致价带发生变化的应变层结构, 属于“价带工程”。本文主要介绍与“价带工程”有关的应变层结构的制备、原理及其潜在的应用等。

## 一、应变层结构的生长<sup>[1,2]</sup>

考虑在晶格常数为  $a_1$  的衬底上生长晶格常数为  $a_2$  的薄外延层, 对于足够薄的外延层, 中间每个单原子层都经受了应变。在垂直于生

长方向的平面内, 外延层受到双轴拉伸或压缩的应力作用, 其晶格常数趋于与衬底晶格常数相等。根据泊松原理, 垂直方向晶格常数的变化正好与外延平面的晶格常数的变化相反。例如, 若  $a_2 < a_1$ , 外延平面受到压缩的应力, 平行于平面方向的晶格常数减小, 垂直方向的晶格常数增大。

如上所述, 由于外延层的弹性作用, 在衬底和外延层材料晶格常数不同的情况下, 仍可以生长出失配位错很少的外延层。理论和实验都表明, 这样生长的外延层其厚度存在一个临界参数, 即临界厚度  $h_c$ 。在  $h_c$  以下外延层处于热力学平衡态, 其失配位错很少。在  $h_c$  以上, 外延层积累了足够的能量, 只能以位错的形式释放应变能, 这样在外延层内会出现大量的失配位错。由此可见, 在应变层结构的生长中,  $h_c$  是一个很关键的参数, 人们根据不同的生长模型已经推出了几种  $h_c$  的理论表达式。

详细的实验研究集中在 GaAs 上生长  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  和 Si 上生长  $\text{Ga}_x\text{Si}_{1-x}$  合金这两个系统上。这两个系统的最大晶格失配分别为 7% 和 4%。实验表明, 在较宽的应变和外延层厚度(超过临界厚度)的范围内都可以生长出失配位错很少的应变层<sup>[3,4]</sup>。

## 二、应变层量子阱的电子结构<sup>[5]</sup>

图 1(a) 所示的是正常的四面体结构的直接带隙半导体的能带结构图(图中  $k_{\perp}$  和  $k_{\parallel}$  分

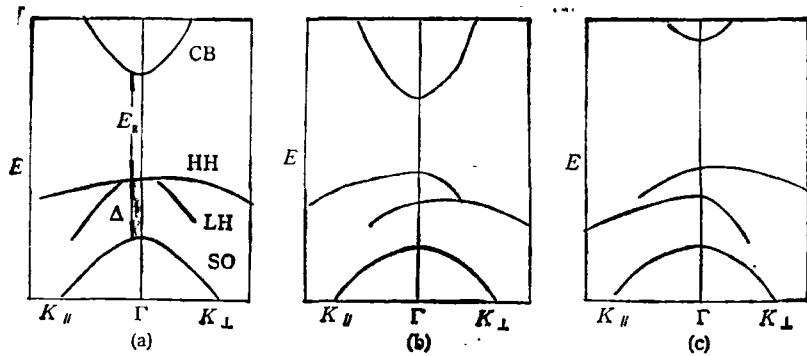


图 1

- (a) 无应变直接带隙立方半导体能带结构 (CB 为最低的导带 LH 为轻空穴带, HH 为重空穴带, SO 为自旋轨道耦合分裂出的能带);
- (b) 受双轴拉伸应力下的应变半导体能带结构;
- (c) 受双轴压缩下的应变半导体能带结构.

别是生长方向和生长面内波矢的分量, 它们被合并在一幅图上)。图 1(b) 和图 1(c) 所示的分别是半导体在受到平行于生长面的双轴拉伸和压缩情况下的能带结构图。在图 1 所示的三种情况下, 导带极小值均位于波矢  $k$  为零或很小处, 能量和  $k$  值呈抛物线形状 ( $k$  很小时), 对导带可以表示为:

$$E(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$$

这里的  $\hbar k$  是电子的准动量,  $E_g$  为禁带宽度,  $m_n^*$  为电子的有效质量, 价带极大值作为能量的零点 (即向下的抛物线的顶点)。

在无应变情况下, 重空穴 (有效质量大) 带 HH 和轻空穴 (有效质量小) 带 LH 在  $k = 0$  处  $E$  相同。

因为双轴应力破坏了半导体的立方对称结构, 使半导体的能带结构发生了变化, 导致了重空穴带和轻空穴带在  $k = 0$  处分开, 并且出现了各向异性的价带结构。如图 1(b) 所示, 半导体受到双轴拉伸应力, 沿生长方向 ( $k_{\perp}$ ) 的最高价带是轻空穴带, 与  $k_{\perp}$  垂直方向  $k_{\parallel}$  (位于生长面) 上的最高价带是重空穴带。图 1(c) 所示的是半导体受到压缩的情况下的能带结构, 与图 1(b) 所示的情况相反。

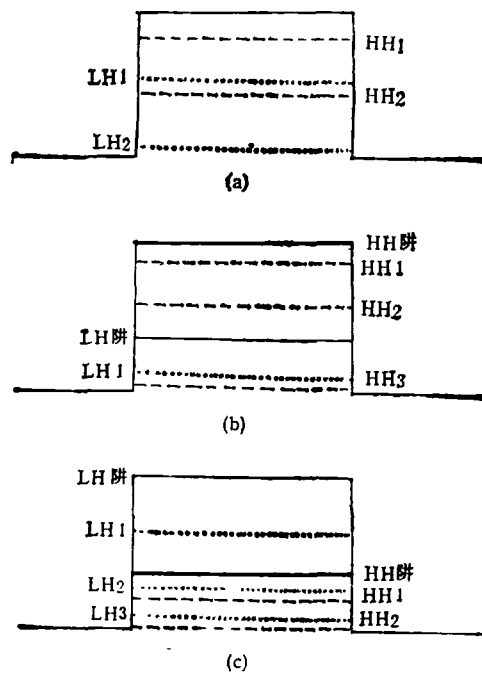


图 2 量子阱结构空穴束缚能量示意图

- (a) 无应变量子阱; (b) 双轴压缩下的量子阱;
- (c) 双轴拉伸下的量子阱
- (HH1, HH2, HH3 为重空穴第一、第二、第三能级;
- LH1, LH2, LH3 为轻空穴第一、第二、第三能级)

上述的能带变化将会对应变的量子阱结构有很大的影响。为了说明这个问题, 首先对晶

格匹配的量子阱结构作一介绍。图 2(a) 所示的是无应变的量子阱结构。因为异质外延层的厚度很小,载流子沿生长方向是量子化的,但是在阱平面内是自由运动的,波矢量为  $k_{\parallel}$ 。这种晶格匹配的量子阱结构提供了“能带工程”应用的可能性<sup>[6]</sup>。在半导体和晶格匹配的量子阱中导带特性可以借助于很多的方法调制,例如采用合金的方法、改变量子阱厚度的方法等。但价带的特性主要由重空穴带起作用。上述的办法对价带特性的调制作用很小。

应变层结构提供了改变价带特性的可能性。在受到双轴压缩的应变层(如 Si 上生长 Ge)的情形下,重空穴带顶相对于轻空穴带顶向上漂移,量子阱中的重空穴最高子能级  $HH_1$  与轻空穴最高子能级  $LH_1$  的差值增大[图 2(b)]。在受到双轴拉伸的应变层(如 AeSb 上生长 GaSb)的情形下,变化正好相反,第一个重空穴子能级相对于第一个轻空穴子能级向下漂移,两者间隔减小,甚至出现  $LH_1$  能级高于  $HH_1$  能级的情况[图 2(c)]<sup>[7]</sup>。在应变层量子阱结构中,可以通过改变阱宽控制两个最高重空穴能级的差值(即  $HH_1 - HH_2$ ),又可以通过控制轴应变控制最高重空穴和最高轻空穴能级的差值(即  $HH_1 - LH_1$ )。

在不存在子能带混合的情况下,量子阱平面的  $E$  和  $k$  的关系类似于图 1 所示的应变半导体的关系。在应变方向束缚态重空穴具有较低的平面有效质量。然而束缚态纯轻空穴或重空穴特性只有在  $k_{\parallel} = 0$  处才能表现出来。对于有限的波矢量  $k_{\parallel}$ ,轻空穴特性是相互混合的。由于应变和轻空穴态混合两者的作用,使得可能的价带子能带的  $E$  和  $k$  的关系呈现多样性<sup>[8,9]</sup>。从而可以在不同材料中利用不同的应变去改变载流子的有效质量满足新器件的需要。

### 三、“价带工程”在器件中的应用

如上所述,由于双轴应力的作用,应变层结构的价带发生了明显的变化,因而引出了一些

物理

新的物理效应。根据这些物理效应,人们提出了许多新器件的构想,其中有些已经付诸实践。这些器件主要有,互补逻辑电路中的高空穴迁移率晶体管,空穴导电的耿氏二极管,低阈值电流密度,长波长激光器,高灵敏度的光探测器、调制器等。

#### 1. 输运效应的应用<sup>[10,11]</sup>

载流子的迁移率可表示为  $\mu = q\tau/m^*$ 。 $\tau$  为载流子的驰豫时间,而  $\tau$  与有效质量的关系是成反比的,因而就有  $\mu \propto m^{*-2}$ 。如果在相当大的能量范围内最高价带是轻空穴带,空穴的迁移率将足够大。根据这一原理,可以制造高空穴迁移率晶体管。把这种器件应用于互补电路中,会大大提高电路速度,因为目前这种电路的速度主要受 p-沟器件速度的限制。上述轻空穴效应已经在 GaAs-InGaAs 应变超晶格中观察到了,轻空穴有效质量的  $0.14m_0$ ,与无应变的半导体相比,至少下降了两倍。在 p-沟 GaAs 晶体管中插入 InGaAs 层,制造应变量子阱结构的场效应晶体管,77K 下,空穴速度与无应变的 InGaAs 系统相比高五倍,由于调制掺杂,空穴迁移率又增加了一倍。这种器件在 77K 下创造了最高电流密度的记录,具有相当可观的跨导。说明应变层结构,对于高空穴器件的应用具有诱人的前景。

根据推测,应用应变层结构还可以制造与轻空穴有关的热载流子效应器件,在低电场下,空穴位于价带顶,具有低的有效质量和高迁移率。随着电场增加,空穴被激发到高能带上。有两个效应将减小空穴迁移率。首先,最高子能带是非抛物线型的,有效质量随能量的增加而减小,在能量  $E$  很大时,  $m^*(E)$  达到体内重空穴有效质量的数值  $m_h^*$ 。其次,作为一种新的散射机理,在能量较大时,空穴发生带间散射。由于这两种效应使空穴迁移率依赖于电场,如果输运发生的足够迅速,会出现微分负阻效应。根据这一原理,可以制造空穴导电的耿氏二极管。

#### 2. 应变层激光器<sup>[12]</sup>

应用于激光器制造的半导体材料,在理想

情况下,其能带结构应当是导带和价带都应有低的有效质量。但是,常规的半导体激光器材料,只能满足其中的一个。导带具有低的有效质量  $m_c^*$ ,但是最高价带总是重空穴带,具有大的有效质量  $m_v^*$ 。较大的有效质量使得价带态密度也较大。因而使得分布反转所需的载流子浓度增大。在长波长激光器中,高的态密度也导致俄歇复合和带间吸收的增大。最高价带具有低有效质量的应变层半导体结构,用于激光器的制造有许多优点,它即减小了反转所需的载流子浓度,又有效地消除了  $1.3\mu\text{m}$  或更长波长光的损失。这些优点总的效果是急剧地减小了阈值电流密度,也减小了温度敏感性。量子效率对温度的依赖性也减小了。这对于工作电流几倍于阈值电流的激光器是相当重要的。

#### 四、典型的应变层结构材料

应变层结构提供了“价带工程”应用的可能性,同时也大大丰富了异质外延层的种类。应变层结构允许使用晶格常数不同,性质不同的材料组合,使这些结构具有新的特性,为开发新的高性能的器件奠定了基础。下面我们简单地介绍几种典型的应变层结构的特点。

##### 1. $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ 结构<sup>[13]</sup>

Si 器件工艺是最成熟的半导体工艺技术,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金本征跃迁发光波长范围是  $1.3-1.55\mu\text{m}$ , 这个范围的光对研究光纤通讯应用的人来说是很感兴趣的。但是,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金是间接带隙半导体,不适合直接用作发光材料。Si 上生长  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金的短周期超晶格,由于能带交叠,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金转变为直接带隙材料,提供了制造以硅为基础的光源器件和光探测器的可能。这种结构还可制造电子调制掺杂场效应晶体管,空穴调制掺杂场效应晶体管和异质结双极晶体管等器件。另外,生长无位错

$\text{GeSi}$  合金层的厚度已经远远超过热平衡理论所预言的极限,这更增加了这种结构的实用性。

##### 2. $\text{GaAs}/\text{Si}$ <sup>[14]</sup>

$\text{GaAs}$  是直接带隙半导体,又具有迁移率高的特点。适合制造光电器件和高速器件。Si 具有机械性能好,热导率高等优点,并且价格便宜,适合于大规模集成电路的制造。发展 Si 上生长  $\text{GaAs}$  可充分发挥两者的优点。这种结构可以用于制造异质结双极晶体管、场效应晶体管、发光二极管、激光器、光探测器、调制器等器件。Si 上生长  $\text{GaAs}$  结构应用的最大潜力是用于集成电路的制造。在同一芯片上分别制造出  $\text{GaAs}$  器件和 Si 器件,使整个电路达到最佳设计。

##### 3. $\text{GaAs}$ 为衬底的应变层结构<sup>[3,5]</sup>

这是发展的较早的应变层结构,这种结构在经历循环的热处理和离子注入以后仍能保持稳定,这对器件制造来说是至关重要的,这些结构已经成功地应用于制造高电子迁移率晶体管和异质结双极晶体管等。

- [1] R. People and J. C. Bean, *Appl. Phys. Lett.*, **47**(1985), 322.
- [2] R. People, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-22**(1986), 1696.
- [3] I. J. Fritz et al., *Appl. Phys. Lett.*, **46**(1985), 967.
- [4] J. C. Bean et al., *J. Vac. Sci. Technol. A*, **2**(1984), 436.
- [5] E. P. O'Reilly, *Semiconductor Sci. and Technol.*, **4**(1989), 121.
- [6] H. Sakaki, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-22**(1986), 1845.
- [7] P. Voisin et al., *Phys. Rev. B*, **30**(1984), 2276.
- [8] E. P. O'Reilly et al., *Phys. Rev. B*, **34**(1986), 6030.
- [9] Y. C. Chang, *Appl. Phys. Lett.*, **46**(1985), 710.
- [10] J. E. Schirber, et al., *Appl. Phys. Lett.*, **46**(1985), 187.
- [11] G. C. Osbourn et al., *J. Vac. Sci., Technol. A*, **3**(1985), 826.
- [12] A. P. Adam, *Electron. Lett.*, **22**(1986), 249.
- [13] C. Tohn, et al., *J. Crystal Growth*, **81**(1987), 411.
- [14] H. Morkoc, *J. Crystal Growth*, **95**(1989), 79.