四：半导体超晶格材料

Thursday, March 5, 2020 1:46 AM

1. 超晶格：

   两种或两种以上性质不同的薄膜相互交替生长而形成的多层结构的晶体；

2. 负微分电阻效应：

   电压增大、电流减小。在负阻区，半导体中载流子浓度局部的微小涨落即可引起非平衡载流子的大量积累而产生空间电荷；

   超晶格材料的超晶格周期，使它具有一种较小的布里渊区和较窄的宽度的子能带，则通过电场就可以把电子同能带底部(正阻区)加速到能带的顶部(负阻区)；

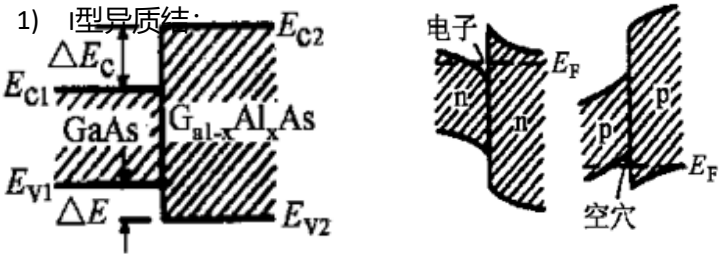
3. 超晶格的分类：

   a. 组分超晶格：

      超晶格材料中的一个重复单元由两种不同材料组成，其电子亲合势、禁带宽度均不相同。在组分超晶格中，由于构成超晶格的材料具有不同的禁带宽度，在异质界面将发生能带的不连续；

      i. 异质结分类：

         1) I型异质结：



            窄带材料的禁带完全落在宽带材料的禁带中，ΔE_C和ΔE_V的符号相反；

            不论对电子还是空穴，窄带材料都是势阱，宽带材料都是势垒，即电子和空穴被束缚在同一材料中；

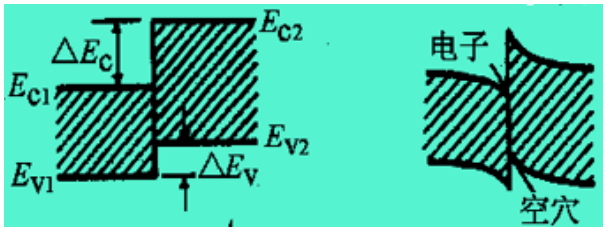
            载流子复合发生在窄带材料一侧；

            i) 适合制作激光器；

         2) II型异质结：

            ΔE_C和ΔE_V的符号相同；

            a) IIA类超晶格：

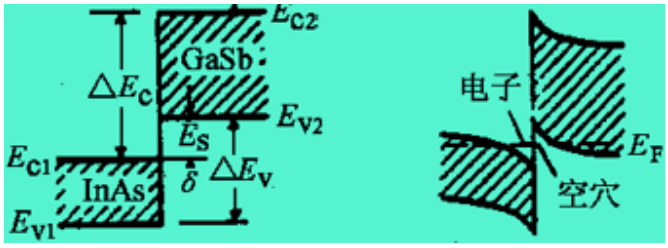


            材料1的导带和价带都比材料2的低，禁带是错开的。

            材料1是电子的势阱，材料2是空穴的势阱。

            电子和空穴分别被束缚在两材料中；

            b) IIB类超晶格：



禁带错开更大，窄带材料的导带底和价带顶都位于宽带材料的价带中，由金属化现象；

One. 适合做红外波段材料；

3) III型超晶格：



其中一种材料具有零带隙。

组成超晶格后，由于它的电子有效质量为负，将形成界面态；

i) 适合研究红外特性；

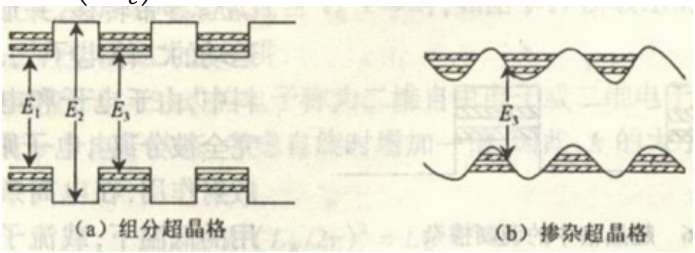
ii. 组分超晶格的制备：

目前主要是MBE(分子束外延)和MOCVD(金属有机物化学气相沉积)；

1) 制备时生长速率应能精确地控制，以保证各层厚度地重复性；
2) 异质结界面应该平坦，粗糙度低，组分变化陡峭。即生长时源地变化要快，且保证晶体质量地条件下生长温度尽可能低，防止层间组分地互扩散；
3) 晶格完整性要好，失配度小，失配位错少，表面形貌要好；
4) 各层化合物组分控制要精确，特别是多元化合物地组分还应均匀；
5) 如果需要掺杂，掺杂量及其均匀分布也应精确控制；

b. 掺杂超晶格：

$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\right)\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$，L不能太大，否则是量子阱而非超晶格；



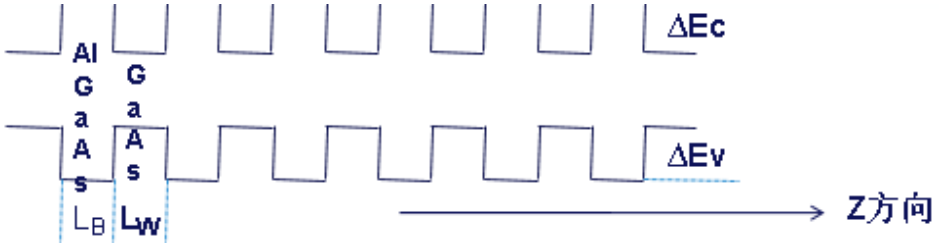
在同一半导体材料中，用交替改变掺杂类型的方法形成的超晶格；

i. 优点：

1) 任何一种半导体材料只要很好控制掺杂类型都可以做成超晶格；
2) 多层结构的完整性好；
3) 有效能隙可以具有从零到未调制的基本材料能量隙之间的任何值；

4. 超晶格地主要特性：

a. 单一势阱中地电子状态(量子限制效应)：



Z方向地薛定谔方程(以原点势阱为中心):

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*}\cdot\frac{d^2\phi}{d^2z^2}=E\phi, |z|\le\frac{L_W}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*}\cdot\frac{d^2\phi}{d^2z^2}+V\phi_0=E\phi, |z|\ge\frac{L_W}{2} \end{cases}$$

2式中，当ΔE_C足够大时，根据波函数应满足地连续性和有限性条件，只有当$\psi=0$时，2式才成立，所以有:

$$\psi=0, |z|\ge\frac{L_W}{2}$$

这个式子作为解1式地边界条件;

当势垒高度$V_0(\Delta E_C)$很大时（$V_0\to\infty$），1式地能量本征值为:

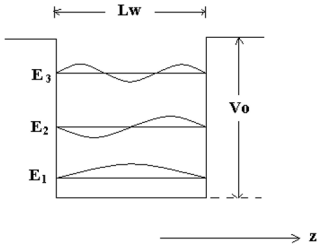
$$E_n=\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{n\pi}{L_W}\right)^2$$

其中，n为量子数;

当考虑归一化条件时，对应这种状态地波函数为:

$$\phi_n(z)=\sqrt{\frac{2}{L_W}}\sin\frac{n\pi}{L_w}\left(z+\frac{1}{2}L_W\right), |z|\le\frac{L_w}{2}$$

当n=1、2、3时,如图:



在与势阱垂直面(xy面)中地电子行为与自由电子一样，其总能量E可表示为:

$$E=E_n+\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2+k_y^2\right)$$

其中，k_x, k_y为xy面内的波矢的x、y成分

综上，一般体单晶半导体中连续的电子状态为:

$$E(k)=\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right)=\frac{p^2}{2m^*}$$

而在单一势阱中则变为分离状态，而且当$V_0\to\infty$时，可以把电子完全限制在势阱中，这种势阱称为量子阱;

i. 量子阱:

两种不同的半导体材料相间排列形成的、具有明显量子限制效应的电子或空穴的势阱。量子阱的最基本特征是：由于量子阱宽度(只有当阱宽尺度足够小时才能形成量子阱)的限制，导致载流子波函数在一维方向上的局域化;

1) 多量子阱:

由2种不同半导体材料薄层交替生长形成的多层结构中，如果势垒层足够

厚，以至相邻势阱之间载流子波函数之间耦合很小，则多层结构将形成许多分离的量子阱；

2) 超晶格(耦合的多量子阱)：

如果势垒层很薄，相邻阱之间的耦合很强，原来在各量子阱中分立的能级将扩展成能带（微带），能带的宽度和位置与势阱的深度、宽度及势垒的厚度有关，这样的多层结构称为超晶格；

具有超晶格特点的结构有时称为耦合的多量子阱；

b. 隧道效应；

c. 子能带形成：

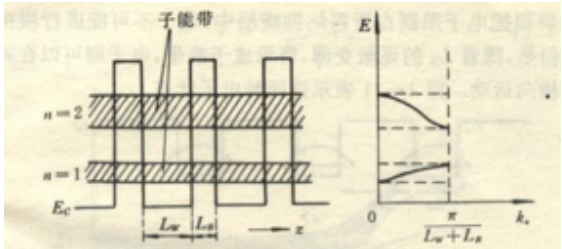


图 1—9 子能带图

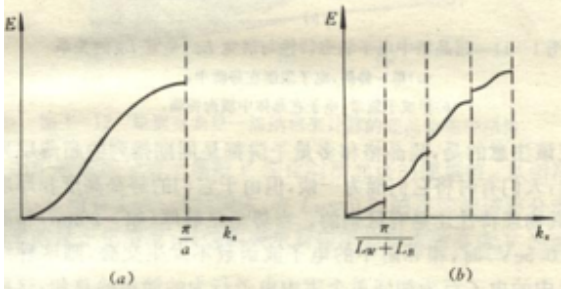


图 1—10 布里渊区中能带

(a)体单晶的能带；(b)超晶格的能带。

d. 载流子迁移率的提高(接近理想的二维电子系数)；

e. 异质结界面中载流子的实空间跃迁(用于制作微波器件)；

f. 超晶格材料的金属化；

g. 布洛赫振动：利用超晶格材料来实现在电场作用下的一种振动效应；

5. 应变超晶格：

当两种不同的材料构成超晶格时，若两种材料晶格常数相差较大时，会在界面处产生缺陷，得不到好的超晶格材料。

但当多层薄膜厚度十分薄时，晶体生长时会产生很少的缺陷，即实在弹性形变限度内，晶格本身的应变使缺陷消除，可制备好的超晶格材料(应变超晶格)；

a. 晶格常数：

$$a_0 = a_1\left(1+\frac{fc_2h_2}{c_1h_1+c_2h_2}\right) = a_2\left(1-\frac{fc_1h_1}{c_1h_1+c_2h_2}\right)$$

b. 禁带宽度：

受应变的影响，不仅应变超晶格材料的能带结构发生变化，同时原成份材料的禁带宽度也要发生变化；

i. 能带折叠效应：间接跃迁→直接跃迁；

c. 有效质量：

在一般超晶格中，由于量子效应价带中的重空穴和轻空穴能带的简并度被消除；

能带折叠效应，能带结构和载流子的有效质量发生变化；

应力时，能带结构发生变化而导致有效质量变化；

在应变超晶格中，根据其周期结构的研究可能控制载流子的有效质量；

i. 对电导有贡献的是轻空穴；

6. 非晶态半导体材料：
   a. 优点：
      i. 改善了超晶格结构的柔软性；
      ii. 在非晶态的情况下，由于结构的自由度大，晶格不匹配得到缓和；
      iii. 由于容易改变非晶态太了本身的物理性质，使器件设计上的自由度更大；
      iv. 在较低温度上生长以及容易形成大面积；
7. 还有多维超晶格；
8. 完；