

内建电场对纳构半导体功函数的调制

安盼龙^{1,3}, 赵瑞娟², 许丽萍³, 杨 艳³

- (1. 中北大学电子测试技术国家重点实验室, 山西 太原 030051;
2. 中北大学仪器科学与动态测试教育部重点实验室, 山西 太原 030051;
3. 中北大学理学院, 山西 太原 030051)

摘 要:从理论上分析了纳结构半导体内建电场产生条件, 以及如何对内建电场进行调制, 并通过对内建电场进行调制进而对半导体的功函数进行调制, 推导出了内建电场与功函数的简易关系, 并进行了模拟计算, 为进一步实现介观光电效应, 制造介观光电器件提供理论支撑。

关键词:内建电场; 异质结; 量子阱; 功函数; 介观光电效应

中图分类号: TB383 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.1674-2869.2011.04.013

0 引 言

内建电场的产生机理与分布复杂多样, 国内外对内建电场的全面报道较少, 关于半导体功函数全面报道的相关文献也不多, 但是由于内建电场对纳米结构中的电子能态会产生较大的影响; 而共振隧穿电流是与电子能态有直接关系, 内建电场可以对电子能态进行内部调制, 从而使电子的共振隧穿研究前景非常诱人. 通过对内建电场的大小和方向进行人为调制, 实现对多量子阱材料的截止频率、敏感光频、灵敏度等进行有效调制, 找出内建电场对介观光电效应调节的最优方式, 为研制相关光敏器件提供理论依据。

1 内建电场的产生与调制

纳结构中内建电场主要来源于半导体 PN 结内场、晶体的压电效应、铁电体的自发极化. 内建电场对半导体的功函数的调制主要通过以下几个方面。

1.1 通过晶体的压电效应进行调制

超晶格多量子阱中的应力分析^[1-2]: 对于具有压电特性的晶体, 要产生内建电场, 可以由超晶格量子阱应变产生. 晶体的完全相干生长(晶粒的尺寸与超晶格垒阱的厚度基本相等)的立方晶系周期性超晶格, 其四方形变为:

$$\Delta\epsilon = \epsilon'' - \epsilon^\perp = \Delta\epsilon \times \epsilon''$$

$$\Delta\epsilon = \frac{3B}{\Delta} [C_{44}^2 + CC_{44}(1 - T_{33}) + 3C^2(l_3 m_3 n_3)^2]$$

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3$$

$$T_{33} = l_3^4 + m_3^4 + n_3^4$$

$$C = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$$

其中, B 为体弹性模量, ϵ'' 为平面应变。

如果不考虑完全相干生长, 室温下完全不相干生长的立方晶系周期性超晶格多量子阱中的四方形变可写作如下形式:

$$\Delta\epsilon' = \Delta\epsilon[\beta - \beta']\Delta T_g$$

式中: ΔT_g 为生长温度与室温之差, β 为室温下的热膨胀系数, β' 为公共热膨胀系数. $\Delta\epsilon$ 由超晶格的弹性系数和生长方向决定. 一般情况下, 形变可表示为:

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon' + \delta\epsilon$$

其中: $\delta\epsilon$ 由完全相干生长决定, 它可以通过计算和测试定量给出。

由于 GaAs 和 AlAs 层的压电系数不同, 纳结构中的形变将产生极化电场, 此内建电场与形变的关系可以写为

$$E = A\Delta\epsilon$$

其中: A 为常数, 内建电场为超晶格生长方向的连续或者离散函数. 由于压电场的存在, 导致方势阱发生倾斜与带阶的产生. 由压电场引起的价带阶, 其在势阱两边的差值可写为如下形式:

$$\Delta V_B = e \begin{cases} \sum_{i=1}^2 \int_{h_0}^{h_i} E_i(x) dx & \text{和 } 0 & e'_1 e'_2 > 0 \\ \int_0^{h_1} E_1(x) dx & \text{和 } \int_0^{h_2} E_2(x) dx & e'_1 e'_2 < 0 \\ \int_0^h E(x) dx & \text{和 } 0 & e'_1 e'_2 = 0 \end{cases}$$

其中: e 为电荷, e'_1 和 e'_2 为临近层的压电系数, h_i 为第 i 极化层的厚度 ($i=1,2$).

对于具有压电特性的晶体,其压电极化强度与应变的关系为:

$$\begin{aligned} p'_3 &= \left[-\frac{3Be'\epsilon''}{\Delta} \right] [(C_{11}-C_{12})^2 + \\ & 2C_{44}^2 - C^2 T_{33}] \times (l_3 m_3 n_3) \\ E_3 &= -\frac{p_3}{\epsilon_0 k_s} \end{aligned}$$

ϵ_0 为真空电容率, k_s 为相关层的相对电容率, e' 为压电系数, p'_3 为沿生长方向的极化强度, l, m, n 分别为生长方向与晶轴方向夹角余弦,压电场仅在三个方向余弦 l_3, m_3, n_3 都不为零的生长方向上产生.

要调制半导体的功函数,可通过调节晶体的应力方向、大小来产生不同内建电场,使半导体的费米能级发生改变.

1.2 通过铁电晶体的自发极化进行调制

在半导体超晶格异质结铁电材料中内建电场和极化电荷之间的关系为:

$$E_m = L_B (P_B - P_W) / [\epsilon_0 (L_W \epsilon_B + L_B \epsilon_W)]$$

ϵ_B, ϵ_W 分别为势垒和势阱的电容率, L_B, L_W 分别为对应势垒和势阱宽度, P_B 和 P_W 分别表示垒和阱的极化电荷电极化强度,可以改变垒、阱的宽度来调节内建电场的大小.

2 内建电场对半导体功函数调制模拟

2.1 突变型 PN 结内建电场对功函数进行调制

N 区电场强度最大值:

$$E_{\max} = \frac{q N_D x_N}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

P 区电场强度最大值:

$$E_{\max} = \frac{q N_A x_P}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

q 为电荷电量, N_D, N_A 分别为施主、受主杂质浓度, x_N, x_P 分别为 N、P 区宽度, ϵ_0 为真空电容率, ϵ_r 为相对电容率.

P 区内建电场的大小:

$$E_x = E_{\max} \left(1 - \frac{x}{x_P} \right) \quad 0 < x < x_P$$

N 区内建电场的大小:

$$E_x = E_{\max} \left(1 + \frac{x}{x_N} \right) \quad -x_N < x < 0$$

简化计算内建电势解析式:

$$V_{inP} = \frac{q N_A x_P}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(1 - \frac{x}{x_P} \right) x \quad 0 < x < x_P$$

$$V_{inN} = \frac{q N_D x_N}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(1 + \frac{x}{x_N} \right) x \quad -x_N < x < 0$$

$$\Delta W = E_{FN} - E_{FP} = \frac{q^2 N_D x_N}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(1 + \frac{x}{x_N} \right) x -$$

$$\frac{q^2 N_A x_P}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left(1 - \frac{x}{x_P} \right) x$$

采用数值模拟,图 1 左图纵坐标对应 N 区内建电势的分布曲线,区间 $[-2,0]$ V,横坐标对应的为 $[0,2] \times 10^{-8}$ m 的 N 区宽度;右图纵坐标对应 P 区内建电势的分布曲线,区间 $[0,-60]$ V,横坐标对应的为 $[-2,0] \times 10^{-8}$ m 的 P 区宽度.对应的模拟掺杂浓度 N_D 和 N_A 范围从 $10^{14} \sim 10^{26}$ 变化; x_N 与 x_P 分别取 14 nm.

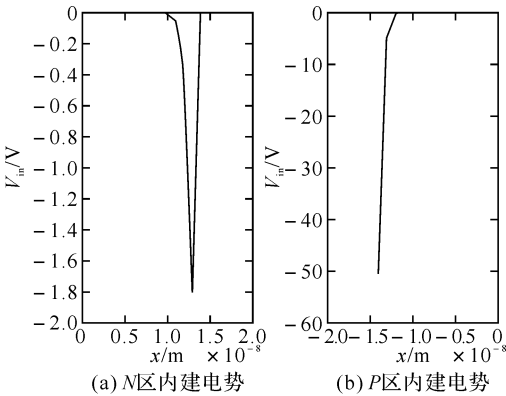


图 1 内建电势分布曲线图

Fig. 1 Built-in voltage distribution curve 两种情况下的电场分布示意图见图 2.

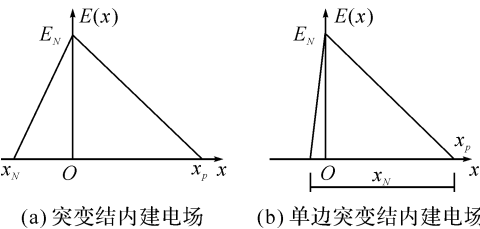


图 2 电场分布示意图

Fig. 2 Abrupt junction built-in electric field distribution diagram (a) and one sided step junction built-in electric field (b)

由以上可知两种掺杂浓度不同的材料接触产生内建电场,在材料不同的位置有不同的内建电势,要对半导体功函数进行调制,可调节掺杂浓度^[3].

2.2 内建电场和功函数关系模拟

半导体功函数的表达式为 $W=E_0-E_F$.
为了简化计算,设 $E_0=0$,则 $W=-E_F$,有

$$\begin{aligned} E_{FN} &= E_c + K_B T \left[\ln \frac{n}{N_C} + \frac{1}{\sqrt{8}} \frac{n}{N_C} \right] \\ E_{FP} &= E_v + K_B T \left[\ln \frac{p}{N_V} + \frac{1}{\sqrt{8}} \frac{p}{N_V} \right] \\ n &= \frac{N_D - N_A}{2} + \left[\left(\frac{N_D - N_A}{2} \right)^2 + n_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ p &= \frac{n_i^2}{n} = \frac{N_A - N_D}{2} + \left[\left(\frac{N_A - N_D}{2} \right)^2 + n_i^2 \right]^{\frac{1}{2}} \\ n_i &= \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_C - E_V}{2 K_B T}} = \sqrt{N_C N_V} e^{-\frac{E_g}{2 K_B T}} \\ N_C &= 2 \times \left(\frac{m_{dn} K_B T}{2 \pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \\ N_V &= 2 \times \left(\frac{m_{dp} K_B T}{2 \pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

由以上公式建立数值仿真得到曲线如图 3. 由图 3 可知功函数与掺杂浓度成良好的线形关系.

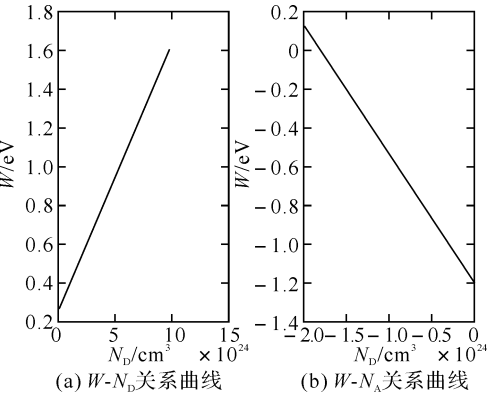


图 3 功函数和掺杂浓度的关系曲线

Fig. 3 Work function and doping concentration curve

3 内建电场和功函数关系结论

本文主要讨论了内建电场与功函数的关系,内建电场的产生主要是由简单的 PN 结产生,也可以由非对称晶体的压电效应和铁电晶体的自发极化效应获得,目前国内外对量子阱内建电场的研究主要是通过压电与自发极化得到^[1-2,4],分析的方法也主要有解泊松方程以及量子阱无限大平面近似由静电高斯定理求解,对于晶体压电内建电场的获得,因为超晶格中内建电场与压力成线性变化^[7],内建电场的产生引起半导体材料载流子

浓度分布的变化,浓度的变化又会引起半导体材料费米能级的变化,从而对半导体自身功函数产生影响.从上述分析可知功函数变化与掺杂浓度成线形关系,自发极化电场原理与此相同,从而利用内建电场对半导体功函数调制从理论上变易.复杂材料超晶格量子阱实际上都可以归结为简单的 PN 原理近似求解,内建电场、电势的人工可调制性,半导体材料功函数可调,决定了量子阱材料内光电的可调性,这为实现介观光电效应提供了理论支撑.

参考文献:

[1] WEN T D, ANAST ASSAKIS E T. Emperature dependence of strains and st resses in undercrit ical cubic superlat tices and heterojunct ions[J]. Physical Review B,1996,53(8):4741.
[2] 温廷敦,张文栋. 介观压阻效应[J]. 微纳电子技术, 2003(7/8):41-43.
[3] 孟庆巨,刘海波,孟庆辉. 半导体器件物理[M]. 北京: 科学出版社,2006:58-62.
[4] Vlasov A P, Sokolovskii B S. The effect of built-in electric field on As diffusion in HgCdTe graded-band-gap epitaxial layers[J]. Thin Solid Films,2004, 459:28-31.
[5] Lai C Y, Hsu T M. Direct measurement of piezoelectric field in In_{0.23} Ga_{0.77} N/GaN multiple quantum wells by electrotransmission spectroscopy [J]. Appl Phys,2007,91:531-533.
[6] Williams D P, Andreev A D. Surface integral determination of built-in electric fields and analysis of exciton binding energies in nitride-based quantum dots[J]. Physica E 2004,21:358-362.
[7] 许丽萍,温廷敦. 超晶格中内建电场的压力调制[J]. 华北工学院学报,2002,23(2):79-81.
[8] Liping Xu, Tingdun Wen, Xiaofeng Yang. Mesopiezoresistive effects in double-barrier resonant tunneling structures[J]. Appl Phys Lett,2008,92: 043508.
[9] Wen T D, Xu L P, Anastassakis E. On the Piezoelectric Signals of Multilayer Systems[J]. Phys Stat Sol(a),2000,177:467-474.

Modulation on work function of nano-semiconductor material
by built-in electric field

AN Pan-long^{1,3}, ZHAO Rui-juan², XU Li-ping³, YANG Yan³

(1. National Key Laboratory for Electronic Measurement Technology, North University of China, Taiyuan 030051, China;
2. Key Laboratory of Instrument Science & Dynamic Measurement, North University of China, Taiyuan 030051, China;
3. School of Science, North University of China, Taiyuan 030051, China)

Abstract: In this paper, the condition and methods of nano-semiconductor built-in electric field were analyzed in theory. The work function of semiconductors was then controlled by the modulation of built-in electric fields, and the relationship between built-in electric field and work function were carried out finally. The simulations of this work provide good support for meso-photoelectric effect and the fabrication of meso-optoelectronic devices.

Key words: built-in electric field; heterojunction; quantum well; work function; meso-photoelectric effect

本文编辑: 龚晓宁



(上接第 49 页)

Study on numerical test based on similar material physical modeling
for rock deformation

XIAO Sheng-qiang¹, CHEN Qing-yun²

(1. Xinjiang Hehuo Mineral and Company, Ltd. WISCO, Hejing 813200, China;
2. School of Environment and Civil Engineering, Wuhan Institute of Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: FLAC numerical modle of deep mining was established with engineering geological characteristics of 34[#] section, based on similar material physical model for rock deformation during shallow mining in the east of Jinshandian Iron ore. Subsequently, according on surface deformation of physical excavation model at -550 m level, mechanical parameters of similar material were optimized by means of BP neural networks and genetic algorithms. Rock deformation of deep mining was studied based on this mode. The results indicated that rock movement angle of the upper plate and lower plate tende to 58°and 63° during deep mining. Using this treament method, not only the cost and time of similar materials physical model were saved, but also error could be controlled within 5% of the allowable range, the results has important reference value for land acquisition and relocation of deep mining.

Key words: deep mining; rock deformation; similar material modeling; numerical test

本文编辑: 龚晓宁