

# GaAs/AlGaAs 双量子阱实空间转移效应模拟与实验

余成章<sup>1,2</sup>, 靳川<sup>1</sup>, 白治中<sup>1</sup>, 陈建新<sup>1\*</sup>

(1. 中国科学院上海技术物理研究所 红外成像材料与器件重点实验室, 上海 200083;

2. 上海科技大学 物质科学与技术学院, 上海 201210)

**摘要:** 用投掷法和有限元差分法计算了单周期调制掺杂 GaAs/AlGaAs 双量子阱的能带结构, 得到基态能级与第一激发态的能级差为 43.3 meV, 并由此推算得到产生载流子横向转移效应的电场强度为 1.2~1.8 kV/cm 之间. 采用 MBE 技术生长了所涉及的双量子阱结构, 通过优化退火条件, 获得了较理想的金属-半导体接触条件. 在此基础上, 测得在电场强度为 1.5 kV/cm 时, 电流-电压曲线呈现出负阻特性. 该电场强度区别于 GaAs 耿氏效应的电场强度, 由此判定, 产生微分负阻的机理是电子由高迁移率导电层到低迁移率导电层的横向转移所致, 即实空间转移.

**关键词:** GaAs/AlGaAs; 微分负阻效应; 实空间转移

**中图分类号:** O472+.4 **文献标识码:** A

## Simulation and experience of realspace transfer effect in GaAs/AlGaAs double quantum well

YU Cheng-Zhang<sup>1,2</sup>, JIN Chuan<sup>1</sup>, BAI Zhi-Zhong<sup>1</sup>, CHEN Jian-Xin<sup>1\*</sup>

(1. Key Laboratory of Infrared Imaging Materials and Detectors, Shanghai Institute of Technical Physics, Shanghai 200083, China;

2. School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China)

**Abstract:** The band structure of a GaAs/AlGaAs double quantum well was calculated via shooting method and finite element method. The energy needed for a ground-excited state transition is 43.3 meV, indicating that a 1.2 to 1.8 kV/cm electric field can cause a horizontal transfer of carriers. The designed double quantum well structure was grown by MBE. Good metal-semiconductor contact was obtained via optimizing annealing conditions. The negative resistance effect was obtained in a 1.5 kV/cm parallel electric field, which is differs from the electric field for GaAs Gunn effect. It was concluded that the mechanism for negative resistance effect is electrons transfer from high mobility layer to low mobility layer, namely real space transfer(RST).

**Key words:** GaAs/AlGaAs, negative differential resistance effect, real space transfer

**PACS:** 72. 20. Fr, 72. 80. Ey, 73. 63. Hs

## 引言

自上世纪七十年代末发现耿氏效应以来, 微分负阻器件吸引了大量的学者对其进行研究. 耿氏效应是利用电场加热电子从而使热电子从低能谷跃迁到高能谷, 由于高能谷中电子迁移率较小, 表现为

材料电阻增大, 即负阻效应. 在耿氏效应的基础上, 1973 年美国科学家 Gribnikov 首次提出了实空间转移(Real Space Transfer, RST)概念<sup>[1]</sup>, RST 器件与传统基于耿氏效应的负阻器件的区别在于, 基于耿氏效应的负阻效应中, 电子是在 k 空间进行转移, 而 RST 则是利用电场加热电子使之从高迁移率的导

收稿日期: 2015-11-02, 修回日期: 2016-04-01

Received date: 2015-11-02, revised date: 2016-04-01

基金项目: 国家自然科学基金(61176082, 61290302, 61534006)

Foundation items: Supported by National Natural Science Foundation of China (61176082, 61290302, 61534006)

作者简介(Biography): 余成章(1991-), 男, 博士研究生, 主要研究方向为异质结中载流子的横向隧穿. E-mail: yuchzh@shanghaitech.edu.cn

\* 通讯作者(Corresponding author): E-mail: jianxinchen@mail.sitp.ac.cn

电层穿横向越过势垒层到达低迁移率导电层从而实现负阻效应的,电子是在实空间中转移,这与传统的负阻器件有着本质的区别. 1979 年 Hess 首次提出可以在 GaAs/AlGaAs 异质结结构中实现 RST 效应<sup>[2]</sup>,日本科学家 Sawaki 改进了 Hess 设计的结构,重新设计了 GaAs/AlGaAs 双量子阱结构,并从电学  $I-V$  特性,PL 光谱特性以及霍尔效应测试载流子浓度各方面证明了在特定电场下,电子确实不同材料层之间实现了纵向转移,即从低迁移率 GaAs 层跃迁到高迁移率 GaAs 层<sup>[3,4]</sup>.

目前,国外关于 RST 效应的研究已有一定的时间,并成功制备出多种具有高频性能好,响应速度快的功能器件<sup>[5-7]</sup>,而国内关于这方面的研究较少,仅有天津大学报道了  $\delta$  掺杂 GaAs/InGaAs 双沟道共振隧穿型实空间转移器件<sup>[8]</sup>,而未见 GaAs/AlGaAs 双量子阱结构的报道. 我们设计并优化了 GaAs/AlGaAs 能带结构,采用分子束外延(MBE)技术生长了材料,在只有一个周期的材料上成功观测到了负阻效应,并且通过实验证明了负阻效应出现的电压与距离成正比,获得了触发 RST 效应的电场强度.

## 1 薛定谔方程的数值求解

对于 RST 效应来说,由于空穴有效质量较大,迁移率较低,因此主要考虑电子的作用. 为了得到材料的电子波函数,我们采用有限元差分法和投掷法,利用 Matlab 软件来求解电子所处能级的本征值,从而得到该本征值对应的波函数<sup>[9]</sup>.

薛定谔方程的标准形式如下:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi(z) + V(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (1)$$

其中,  $\hbar$  为约化普朗克常量,  $z$  为材料生长方向,  $\Psi(z)$ ,  $V(z)$  和  $E$  分别代表波函数,势能和电子能量,  $m^*$  为电子有效质量. 由于量子阱中,电子有效质量为  $z$  的函数,即  $m^*(z)$ ,为了保证方程的厄密性,上述薛定谔方程写成如下形式:

$$\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \Psi(z) = \frac{2}{\hbar^2} [V(z) - E] \Psi(z) \quad (2)$$

利用差分法,可以将式(2)左边写成

$$\frac{\frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{m^*(z)} \right] \frac{\partial}{\partial z} \Psi(z) + \frac{1}{m^*(z+\delta z)} \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \Big|_{z+\delta z} - \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \Big|_{z-\delta z}}{2\delta z} \quad (3)$$

又利用差分方程

$$\frac{\partial f}{\partial z} \Big|_z = \frac{f(z+\delta z) - f(z-\delta z)}{2\delta z} \quad (4)$$

代入式(2)并化简,可得

$$\frac{\Psi(z+2\delta z)}{m^*(z+\delta z)} = \left\{ \frac{2(2\delta z)^2}{\hbar^2} [V(z) - E] + \frac{1}{m^*(z+\delta z)} + \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \right\} \Psi(z) - \frac{\Psi(z-2\delta z)}{m^*(z-\delta z)} \quad (5)$$

对于式(5),当给定能量本征值  $E$ ,当  $\Psi(E,0) = 0, \Psi(E,1) = 1$  时,可以利用 Matlab 通过迭代得到  $\Psi(E, \infty)$ ,考虑边界条件,当  $\Psi(E, \infty) \rightarrow 0$  时,  $E$  即方程(1)的一个能量本征值,从而得到对应的波函数.

## 2 模拟与实验

### 2.1 材料结构与理论分析

图 1 是采用 MBE 设备生长的材料结构及利用投掷法和有限元差分法计算得到的能带结构. 图 1(a) 为材料结构,其具体结构是在本征 GaAs 衬底上依次生长 200 nm 厚的 GaAs 失配缓冲层、40 nm AlGaAs 缓冲层、GaAs//AlGaAs 双量子阱、30 nm AlGaAs 缓冲层和 15 nm 的高掺杂 GaAs 欧姆接触层,其中双量子阱结构为 6 nm AlGaAs 势垒层、6 nm 的高掺杂 GaAs 层、6 nm 的 AlGaAs 势垒层和 14 nm 的本征 GaAs 层. 图 1(b) 为通过投掷法和有限元差分法求解薛定谔方程计算得到  $k=0$  时的有源区能带图. 从图中可以看出, GaAs/AlGaAs 耦合双量子阱结构中一共有五个束缚态能级,其中基态能级  $E_0$  的波函数主要布居于 14 nm 的宽势阱中,而第一激发态能级  $E_1$  的波函数主要布居于 6 nm 的窄势阱中.  $E_1$  和  $E_0$  能级的能量差为 43.3 meV. 在没有外加电场的条件下,电子将处于基态能级,此时电子主要布居在宽 GaAs 势阱中. 如果对材料施加一个平行于势垒方向的电场,电子被加速,当能量达到一定阈值时,将有可能经由散射进入  $E_1$  能级. 而  $E_1$  能级的波函数主要布居于窄势阱中,因而产生实空间转移. 又因为窄 GaAs 层是 Si 掺杂  $7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,由于施主杂质的存在,其电子迁移率较低,这在电学上将表现为随着外加平行电场的增加,材料电阻在施加平行电场达到一定阈值后会迅速增大从而导致电流的降低,也就是微分负阻效应.

根据计算得到的能带图,由于二维电子气浓度大于  $6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,参考文献可得决定电子弛豫时间的主要因素应考虑材料的界面散射<sup>[10]</sup>. 通过粗略估

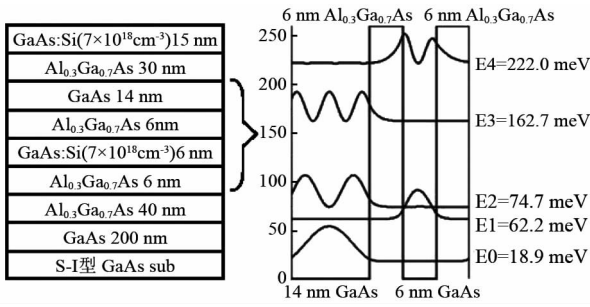


图1 GaAs/AlGaAs 双量子阱结构示意图(a)材料结构,(b)能带结构

Fig.1 Schematic diagram of the GaAs/AlGaAs double quantum wells structure(a), and the electron's band structure(b)

算可以得到 GaAs 中二维电子气弛豫时间在 1 ~ 1.5 ps 之间<sup>[11]</sup>, RST 效应触发电场可以由以下公式推测:

$$\Delta \varepsilon = \frac{(eF\tau)^2}{2m^*} \quad , \quad (6)$$

从而  $F = \frac{\sqrt{2m^* \cdot \Delta \varepsilon}}{e\tau}$ , 其中  $e$  表示单位电荷,  $F$  表示电场强度,  $m^*$  表示电子有效质量,  $\Delta \varepsilon$  表示第一第二能级差,  $\tau$  表示电子弛豫时间, 计算得到  $F$  应该在 1.2 ~ 1.8 kV/cm 之间.

### 2.2 材料生长与制备

材料生长采用分子束外延技术. 根据前面的理论计算, 在本征 GaAs 衬底上成功生长单周期 GaAs/AlGaAs 双量子阱 RST 材料, 其中有源区两边分别是 40 nm 和 30 nm 的 AlGaAs 势垒以保证电子全部聚集在有源区内部. 为了测试该 GaAs/AlGaAs 的 RST 效应, 我们在外延材料上制备了间距分别为 25、30、50、90  $\mu\text{m}$  的电极, 如图 2 所示, 并且测试两个电极间的电流—电压特性. 为了观测二维电子气的电学输运特性, 在工艺过程上我们在生长完金属电极后将顶层高掺杂 GaAs 腐蚀去除. 金属电极用 NiGeAu-NiAu 系统以期在 GaAs/AlGaAs 材料体系中获得较好的欧姆接触. 在实验上观测到 RST 效应的一个关键点在于, 金属电极必须与 GaAs/AlGaAs 结构中的二维电子气形成良好的欧姆接触, 为此我们对材料进行了高温快速热退火处理. 由于 77 K 低温下电子热运动较低, 因此  $I$ - $V$  测试选用液氮降温的低温冷探针平台测试, 此时相对于常温 300 K 情况下将更多的电子会处于第一能级, 即宽势阱也就是高迁移率 GaAs 层中, 这将有利于观测到转移效应.

### 3 结果讨论

图 3 是间距为 50  $\mu\text{m}$  的两电极间分别在 620 $^\circ\text{C}$

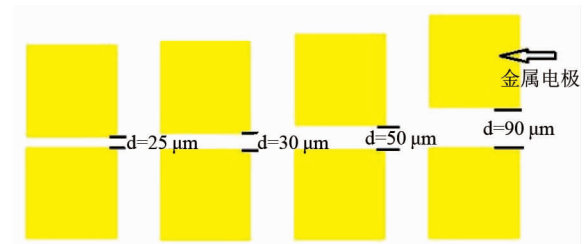


图2 在外延层上生长的间距分别为 25、30、50、90  $\mu\text{m}$  的电极

Fig.2 Schematic diagram of the metal electrodes deposited on epitaxial layer with the distance of 25, 30, 50, 90  $\mu\text{m}$

和 560 $^\circ\text{C}$ , 45 s 退火条件下的电流—电压关系. 测试温度为 77 K. 从图中可以看出, 相对比于 620 $^\circ\text{C}$  的退火条件, 在 560 $^\circ\text{C}$  时, 电流—电压曲线在较低电场时, 显示出良好的线性关系. 同时通过电流—电压关系曲线可以读出两种情况下电阻分别为 210  $\Omega$  和 260  $\Omega$ , 两者差 50  $\Omega$ . 两者的电流—电压曲线均表现出明显的负阻效应, 前者出现负阻效应的触发电压为 7.7 V, 后者为 9.9 V, 两者相差 2.2 V, 饱和电流为 22.5 mA. 在优化后的退火条件下, 材料在 77 K 下电阻仅为 210  $\Omega$  (50  $\mu\text{m}$ ) 和 400  $\Omega$  (90  $\mu\text{m}$ ). 根据 Hall 测试结果, 该双量子阱结构材料在 77 K 下的电子浓度与迁移率, 分别为  $3.754 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  和  $2.145 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ , 利用公式  $\sigma = nq\mu$  和  $R = \frac{1}{\sigma} \cdot \frac{L}{S}$  可以计算得到电极距为 50  $\mu\text{m}$  和 90  $\mu\text{m}$  时, 材料电阻应分别为 153  $\Omega$  和 275  $\Omega$ , 小于实验冷探针测试结果, 考虑可能因为材料是由多层材料构成, 而进行测试霍尔时候未去除表层 GaAs:Si, 其没有完全表面

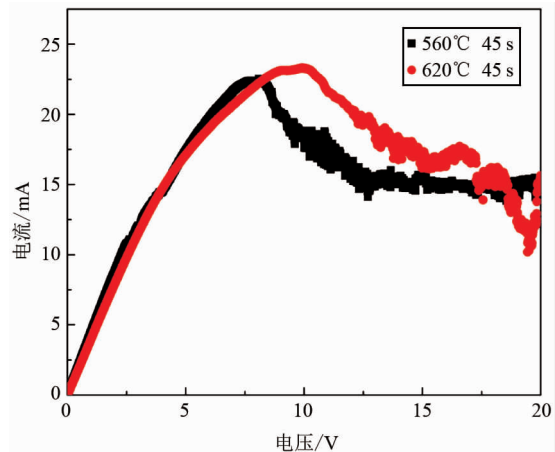


图3 退火温度分别为 620 $^\circ\text{C}$  和 560 $^\circ\text{C}$ , 间距为 50  $\mu\text{m}$  情况下的  $I$ - $V$  曲线

Fig.3 The  $I$ - $V$  curves of sample annealed at temperature of 620 $^\circ\text{C}$  and 560 $^\circ\text{C}$  with electrode 52  $\mu\text{m}$

耗尽,形成平行电导,从而多个材料层并联导致霍尔测试时电阻小于量子阱内电阻.

由于测试时所加偏压较高,而器件的自加热效应将可能引起载流子迁移率降低,从而导致负微分电阻,为了排除这一可能,对间距为  $30\ \mu\text{m}$  的电极进行了测试. 测试结果如图 4 所示. 测试时设置脉冲发生器频率为  $10\ \text{kHz}$ , 脉冲宽度  $5\ \mu\text{s}$ , 占空比为  $5\%$ , 在这一测试条件下可以有效排除器件的热效应. 从图 4 中仍可以观察到明显的负阻效应,因此可以排除器件自加热效应导致的负微分电阻.

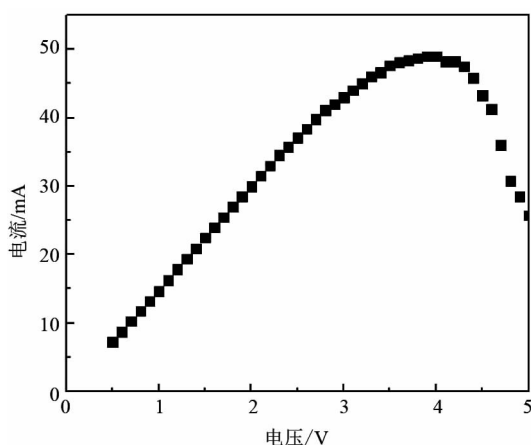


图 4  $560^\circ\text{C}$  下退火  $45\ \text{s}$ , 间距为  $30\ \mu\text{m}$  时利用脉冲发生器测得的负阻效应

Fig. 4 The  $I$ - $V$  curve of sample shows a negative differential resistance effect. The sample with electrodes distance  $30\ \mu\text{m}$  was annealed at temperature of  $560^\circ\text{C}$  for  $45\ \text{s}$

图 5 展示了电极距离分别为  $25\ \mu\text{m}$ ,  $30\ \mu\text{m}$ ,  $50\ \mu\text{m}$ ,  $90\ \mu\text{m}$  情况下的  $I$ - $V$  曲线,可以看出发生负阻效应时候的电压随着间距的增大而变大. 在不同间距情况下,电流随电场强度的变化趋势一致. 对于不同间距的电极,当电场强度在  $0 \sim 1.3\ \text{kV/cm}$  之间,电流-电压曲线呈现出良好的线性,证明材料与电极之间形成良好的欧姆接触,且电阻值保持不变. 在这一阶段电子虽然受到电场作用加速,但是由于弛豫时间较短,电子获得能量较低,因此电子仍处于基态能级,主要布居于宽 GaAs 势阱中. 当电压继续增大,即电场强度大于  $1.3\ \text{kV/cm}$  之后,电流增加逐渐变缓,并在  $1.5\ \text{kV/cm}$  时达到最大值,之后逐渐降低,呈现出微分负阻效应. 在这一阶段,当电场强度在小于  $1.5\ \text{kV/cm}$  时,虽然整体来说电子仍处于基态能级,但是有小部分电子将会由于弛豫时间大于平均弛豫时间,以及能量起伏等因素,获得较高能量而跃迁到第一激发态,即转移到窄 GaAs 势阱中,表现为

电阻增大,电流增加变缓. 当电场强度达到  $1.5\ \text{kV/cm}$  时,更多的电子因为跃迁到第一激发态而转移到窄 GaAs 势阱中,此时电流达到最大值. 之后继续增加电压,电子继续持续转移,电阻继续增大,在电流-电压曲线上表现为电流的继续降低.

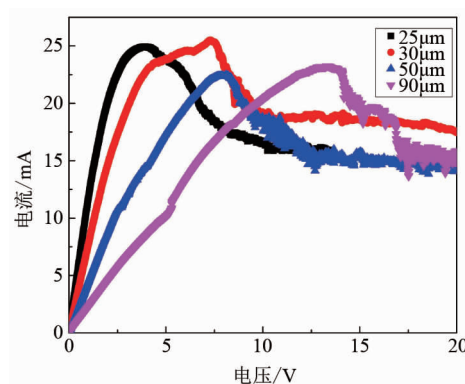


图 5  $560^\circ\text{C}$  下退火  $45\ \text{s}$  测得的负阻效应

Fig. 5 The  $I$ - $V$  curve of sample with electrodes of different distance annealed at  $560^\circ\text{C}$  for  $45\ \text{s}$

图 6 为触发电压与间距的关系,可以看出触发电压与间距呈现良好的线性关系. 由拟合结果得到在不同距离下 RST 效应的阈值电场均为  $1.5\ \text{kV/cm}$  左右,与理论计算相符,并且可以由此推断在  $77\ \text{K}$  温度下电子的散射时间为  $1.25\ \text{ps}$ . 同时  $77\ \text{K}$  下耿氏效应的阈值电场为  $2\ \text{kV/cm}$ <sup>[12]</sup>,与观测到的负阻现象发生电场不同,从而排除了耿氏效应的可能,因此可以判断在 GaAs/AlGaAs 双量子阱材料上观察到了实空间转移负阻效应.

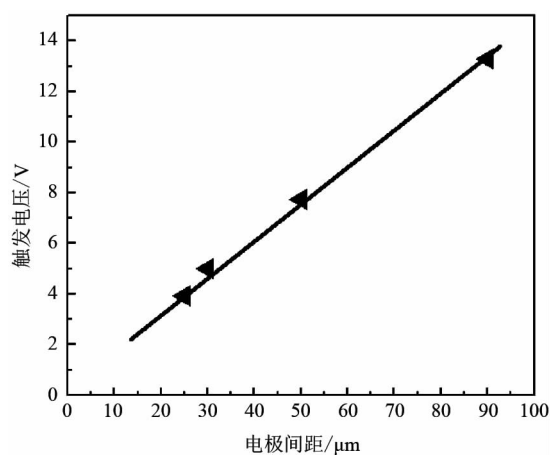


图 6  $560^\circ\text{C}$  下退火  $45\ \text{s}$  测得的负阻效应触发电压与间距的关系

Fig. 6 Threshold voltage vs electrode distance. The samples were annealed at  $560^\circ\text{C}$  for  $45\ \text{s}$

## 4 结论

采用投掷法以及有限差分方法计算了单周期 GaAs/AlGaAs 双量子阱材料的能带结构,在 MBE 设备上生长出材料并成功观测到微分负阻效应,通过优化退火条件,测得在电场强度为 1.5 kV/cm 时电子由高迁移率导电层转移到低迁移率导电层的过程,并排除了期间自加热效应和耿氏效应的可能性.同时证明了电子转移的触发电压与距离成正比,即阈值电场不随距离的改变而改变.但是该材料仍存在一些固有缺陷,比如虽然响应时间短,但是响应之后电子再次穿越 AlGaAs 势垒层回到高迁移率层较慢等,这些问题仍需要进一步的研究和探索.

致谢:本项工作得到国家自然科学基金资助号为 61176082,61290302 和 61534006 的资助.

## References

- [1] Gribniko Z S. Negative differential conductivity in a multi-layer heterostructure [J]. *Soviet Physics Semiconductors-USSR*, 1973, **6**(7): 1204 - 1205.
- [2] Hess K, Morkoc H, Shichijo H, *et al.* Negative differential resistance through real - space electron transfer [J]. *Applied Physics Letters*, 1979, **35**(6): 469 - 471.
- [3] Sawaki N, Suzuki M, Takagaki Y, *et al.* Photo-luminescence studies of hot electrons and real space transfer effect in a double quantum well superlattice [J]. *Superlattices and Microstructures*, 1986, **2**(4): 281 - 285.
- [4] Sawaki N, Suzuki M, Okuno E, *et al.* Real space transfer of two dimensional electrons in double quantum well structures [J]. *Solid-State Electronics*, 1988, **31**(3): 351 - 354.
- [5] Luryi S, Kastalsky A, Gossard A C, *et al.* Charge injection transistor based on real-space hot-electron transfer [J]. *Electron Devices*, IEEE Transactions on, 1984, **31**(6): 832 - 839.
- [6] Kastalsky A, Luryi S. Novel real-space hot-electron transfer devices [J]. *Electron Device Letters*, IEEE, 1983, **4**(9): 334 - 336.
- [7] Šermukšnis E, Liberis J, Matulionis A, *et al.* Hot-electron real-space transfer and longitudinal transport in dual Al-GaN/AlN/{AlGaN/GaN} channels [J]. *Semiconductor Science and Technology*, 2015, **30**(3): 035003.
- [8] Yu X, Mao L H, Guo W L, *et al.* Monostable - bistable transition logic element formed by tunneling real-space transfer transistors with negative differential resistance [J]. *Electron Device Letters*, IEEE, 2010, **31**(11): 1224 - 1226.
- [9] Harrison P. Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures [M]. *John Wiley & Sons*, 2005.
- [10] YANG Bin, CHEN Yong-Hai, WANG Zhan-Guo, *et al.* Study on scattering mechanism of GaAs'/AlGaAs two-dimensional electron Gas (ZDEG) [J]. *Chinese Journal of Semiconductors* (杨斌,陈涌海,王占国,等. GaAs/AlGaAs 二维电子气 (2DEG) 散射机理研究. *半导体学报*). 1995, **16**(4): 248 - 252.
- [11] Ando T, Fowler A B, Stern F. Electronic properties of two-dimensional systems [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1982, **54**(2): 437.
- [12] Higashisaka A. Temperature dependence of Gunn effect in GaAs over the range 77°K to 545°K [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 1970, **9**(5): 583.