

$n\text{-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的能帶結構和霍爾遷移率*

黃美純

(物理系)

摘 要

本文提出一種分析三元半導體合金霍爾遷移率隨組分變化的半經驗方法。詳細描述了 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 電子遷移率變化與能帶結構的關係，在導帶 $\Gamma\text{-L-X}$ 三能谷模型的基礎上，引進能谷遷移率內插法，給出了霍爾遷移率隨組分變化的理論公式，對 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 進行具體計算發現同現有的實驗結果符合得很好。理論曲線與實驗數據的擬合採用 L 帶電子遷移率作為可調參數，因此本方法允許從霍爾遷移率的實驗研究中分析出至今了解甚少的 L 帶遷移率的數值。研究表明，在 $0.15 < x < 0.6$ 的 Al 組分區， L 帶對霍爾遷移率起着重要的作用，它使遷移率由 Γ 帶之值過渡到 X 帶之值的速率變慢。

I、 引 言

三元半導體合金 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 是一種應用極廣的光電子材料。近年來，人們已對它的電學和光學性質進行過許多研究。^[1-7] 在發光二極管、半導體激光器和太陽能電池等重要技術應用的設計中，了解它們的帶隙、載流子濃度和遷移率等參數與 Al 組分 x 之間的關係是非常重要的。因為帶隙決定了發光的波長，載流子在各能帶中的分布直接影響到發光器件的內量子效率，載流子遷移率在結型器件中始終是決定器件性能的一個重要因素。而所有這些量在 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 系統中都由 Al 組分所控制。如何在設計此類器件時兼顧發光波長的選擇、降低電流閾值，提高發光效率和延長使用壽命等等，都必須對這些參數有深入的了解。^[8-9]

對 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 中電子的遷移率與能帶結構關係的研究近來受到廣泛注意。K. Kaneko 等^[2] 測量了摻 Sn 樣品的霍爾遷移率，並用二能谷模型和一組經驗參數解釋其實驗結果。但在他們的研究中，沒有考慮 L 能帶的影響，也忽略了 X 帶中電子遷移率與組分的關係。H. J. Lee 等^[4] 通過霍爾系數和電導率的測量分析了 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 導帶三

* 本文曾在1980年第二屆全國發光學術會上報告。

个能谷的带边方程,并计算了各能谷中各种散射机构的相对重要性,但此方法不能用于迁移率与 x 关系的系统分析。N. Lifshitz等^[13]研究了电阻率与迁移率的压力关系,但对常压下的迁移率与组分关系由于缺乏各能谷中迁移率随组分变化的知识,也没有进行直接的分析。

本文提出一种分析三元合金半导体材料迁移率随组分变化的半经验方法,并具体应用于Ga_{1-x}Al_xAs的计算。它基于对各能谷电子迁移率的内插和导带的 $\Gamma-L-X$ 三能谷模型。给出的 $\mu_H(x)$ 理论公式适于整个组分区,而且只包含一个与L带有关的可调参数。利用组分 $x \rightarrow 0$ 及 $x \rightarrow 1$ 的样品迁移率实验值,调整唯一的可调参数,可使理论曲线同所有已发表的实验数据符合,并从这一拟合中获得至今了解甚少的L带中电子迁移率的数据;我们发现,在 $0.15 < x < 0.6$ 组分区,L带对霍尔迁移率有重要贡献。

I、霍尔迁移率的分析

A. Ga_{1-x}Al_xAs的导带参数

为了分析迁移率与能带结构参数之间的关系,须先选定Ga_{1-x}Al_xAs的导带参数,根据导带的 $\Gamma-L-X$ 三能谷模型,当Al组分 x 从0至1变化时,三个不等价能谷的位置相对于价带顶分别以不同的速率变化,即由GaAs($x=0$)导带的 $\Gamma-L-X$ 能序转变为AlAs($x=1$)的 $X-L-\Gamma$ 能序。与此同时,Ga_{1-x}Al_xAs的能带由直接带隙变为间接带隙,直接-间接带隙交叉点($x_c, E(x_c)$)由 $\Gamma-X$ 带边交叉决定。关于这三个能谷随Al组分变化的规律已经用光致发光法^[5],光吸收法^[6],肖特基势垒光电流法^[10],电反射法^[11]和电子输运法^[4]进行过广泛的研究,但所报告的数据有很大的分散性,不同方法所确定的交叉组分值 x_c 大约在0.34至0.45之间,交叉点能量 $E(x_c)$ 的分散性达150meV, Baldereschi等^[12]用经验势法及推广的VCA方法所计算的 x_c 理论值甚至小至0.31。但即使如此,绝大多数的研究认为, $E_\Gamma(x)$ 和 $E_X(x)$ 可用组分 x 的二次式近似描写,即用GaAs和AlAs的带隙值及一个弯曲参 b_α 数表为

$$E_\alpha(x) = E_\alpha(0) + (E_\alpha(1) - E_\alpha(0) - b_\alpha)x + b_\alpha x^2 \quad (\alpha = \Gamma, X) \quad (1-a)$$

对L能谷的变化所知甚少,为简单起见常用线性近似:

$$E_L(x) = (1-x)E_L(0) + xE_L(1) \quad (1-b)$$

利用Aspnes^[13]给出的 $E_\Gamma(0), E_L(0)$ 和 $E_X(0)$ 之低温值并内插到室温。AlAs的室温参数为 $E_\Gamma(1) = 3.03\text{eV}$ ^[14], $E_L(1) = 2.4\text{eV}$ ^[15]和 $E_X(1) = 2.16\text{eV}$ ^[16]。此外,选用 $\Gamma-X$ 交叉的典型值为 $x_c = 0.370$ 和 $E(x_c) = 1.94\text{eV}$,由方程(1)得:

$$E_\Gamma(x) = 1.425 + 1.267x + 0.338x^2 \quad (2-a)$$

$$E_L(x) = 1.709 + 0.691x \quad (2-b)$$

$$E_X(x) = 1.901 + 0.015x + 0.244x^2 \quad (2-c)$$

我们曾用方程(2)计算Ga_{1-x}Al_xAs中的施主杂质电离能的组分关系,结果与文献[1]的实验一致^[17]。由此给出的能带结构如图1所示。图中各能带带边的交叉点为

$$L-X: \quad x = 0.321 \quad E_{L-X} = 1.931\text{eV}$$

$$\Gamma-X: \quad x_c = 0.370 \quad E_{\Gamma-X} = 1.940\text{eV}$$

$$\Gamma-L: \quad x = 0.399 \quad E_{\Gamma-L} = 1.985\text{eV}$$

同 Lee 等人^[4]最近报告的结果比较,我们注意到,上述各交叉点的组分值比其值低约 0.03,但各点相应的能量仅比 Lee 之值低约 0.01eV。

B. 霍尔迁移率与Al组分的关系

霍尔迁移率定义为

$$\mu_H = |R_H| \sigma \quad (3)$$

考虑到 Ga_{1-x}Al_xAs 中的电子总是按一定的方式分布在 Γ 、L 和 X 三能谷中,因此霍尔系数 R_H 和电导率 σ 须计及此三能谷的贡献。显然

$$|R_H| = \frac{r_H \sum_{\alpha} n_{\alpha} \mu_{\alpha}^2}{q (\sum_{\alpha} n_{\alpha} \mu_{\alpha})^2} \quad (\alpha = \Gamma, L, X) \quad (4)$$

$$\sigma = q \sum_{\alpha} n_{\alpha} \mu_{\alpha} \quad (\alpha = \Gamma, L, X) \quad (5)$$

其中 q 是电子电荷, r_H 是霍尔因子,其值近似为 1,与具体散射机构有关。 n_{α} 和 μ_{α} 分别表示第 α 能谷中的电子浓度和迁移率。在非简并近似下, n_{α} 由下式给出:

$$n_{\alpha} = N_{\alpha} \exp[(E_F - E_{\alpha})/kT]$$

$$N_{\alpha} = 2 \left(\frac{2\pi m_{\alpha} kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (6)$$

N_{α} 是第 α 能谷的有效能级密度,导带电子的总浓度为

$$n_0 = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \quad (7)$$

n_{α} 是温度和 Al 组分的函数。如果样品掺杂条件相同,室温时只需考虑 n_{α} 随 α 的变化, n_0 可视为常数。方程(6)中 E_{α} 是第 α 能谷的带边能量,由方程(2)给出。 m_{α} 是第 α 能谷的状态密度有效质量,对于 L 和 X 能谷须分别包括 4 个和 3 个等价能谷的贡献。它们与 Al 组分的关系可用 GaAs 和 AlAs 的状态密度有效质量值线性内插得^[19],

$$m_{\Gamma}(x)/m_0 = 0.067 + 0.083x \quad (8-a)$$

$$m_L(x)/m_0 = 0.55 + 0.12x \quad (8-b)$$

$$m_X(x)/m_0 = 0.85 - 0.07x \quad (8-c)$$

定义以下四个无因次的参数:

$$A_1(x, T) \equiv n_L/n_{\Gamma} = (m_L/m_{\Gamma})^{3/2} \exp(-\Delta E_1/kT) \quad (9-a)$$

$$A_2(x, T) \equiv n_X/n_\Gamma = (m_X/m_\Gamma)^{3/2} \exp(-\Delta E_2/kT) \quad (9-b)$$

$$B_1(x) \equiv \mu_L/\mu_\Gamma \quad (9-c)$$

$$B_2(x) \equiv \mu_X/\mu_\Gamma \quad (9-d)$$

这些参数的意义是明显的。考虑到不同能谷中电子的散射机构有相似的温度关系, 参数 B_1 和 B_2 可以忽略其温度变化。事实上, 在下面的分析中, 只涉及室温情形, 因而参数 A_1 和 A_2 同样只是 x 的函数, 即上述四个参数完全由能带结构决定。式中

$$\Delta E_1 = E_L(x) - E_\Gamma(x) \quad (10-a)$$

$$\Delta E_2 = E_X(x) - E_\Gamma(x) \quad (10-b)$$

其室温值由方程(2)给出。利用(9)式, 霍尔系数和电导率分别表示为

$$|R_H| = \frac{r_H}{qn_0} f_R(x), \quad (11-a)$$

$$f_R(x) = \frac{(1 + A_1 B_1^2 + A_2 B_2)(1 + A_1 + A_2)}{(1 + A_1 B_1 + A_2 B_2)^2} \quad (11-b)$$

$$\sigma = qn_0 \mu_\Gamma(x) f_\sigma(x), \quad (12-a)$$

$$f_\sigma(x) = \frac{1 + A_1 B_1 + A_2 B_2}{1 + A_1 + A_2} \quad (12-b)$$

因此, 霍尔迁移率为

$$\mu_H(x) = r_H \mu_\Gamma(x) f_\mu(x), \quad (13-a)$$

$$f_\mu(x) = \frac{1 + A_1 B_1^2 + A_2 B_2^2}{1 + A_1 B_1 + A_2 B_2} \quad (13-b)$$

方程(11)~(13)中, $f_R(x)$, $f_\sigma(x)$ 和 $f_\mu(x)$ 分别称为霍尔系数、电导率和迁移率的多谷修正因子。反映了多谷半导体的 R_H , σ 和 μ_H 实验测量值与载流子在这些能谷中的分布方式有关。对于三元半导体化合物, 这些修正因子强烈地依赖于组分 x 。其中霍尔系数多谷修正因子 $f_R(x)$, 只有当 $x \rightarrow 0$ 和 1 时才为 1 , 在其他组分下, $f_R(x) > 1$ 。图2给出了 $295^\circ K$ 时的 f_R 曲线, 其值在 $1 \sim 2.47$ 之间变化, 极大值出现在 $x \sim 0.34$ 。在 $f_R > 1$ 的组分区, $|R_H|$ 的测量值并不直接反映导带中的电子浓度。 f_σ 和 f_μ 也是 x 的复杂函数, 对于 Ga_{1-x}Al_xAs, 它们皆小于 1 , 且易证明:

$$f_\mu(x) \text{ 和 } f_\sigma(x) = \begin{cases} 1, & x = 0 \\ B_2, & x = 1 \end{cases} \quad (14)$$

随着 Al 组分由 $x = 0$ 变为 $x = 1$ 时, 测得的 Ga_{1-x}Al_xAs 电导率和霍尔迁移率将由 GaAs 之值过渡到 AlAs 之值。

为计算 $\mu_H(x)$ 还要知道各能谷中电子迁移率随组分如何变化。在三元合金中, 目前还没有关于 Γ , L 和 X 能谷电子迁移率的测量结果。因为无论霍尔测量或漂移迁移率的直

接测量,其结果都应为三个能谷的综合表现。为了获得 μ_{Γ} 和 μ_X 之值,通常的方法是分别取自 $x \rightarrow 0$ 和 $x \rightarrow 1$ 的样品。方程(13)的具体分析也说明,当 $0 \leq x < 0.15$ 时, $\mu_H(x) \doteq \mu_{\Gamma}(x)$, 而当 $0.6 < x \leq 1$ 时, $\mu_H(x) \doteq \mu_X(x)$, 但这是 μ_H 随组分变化相对不显著的两个组分区,由此得到的实际上是 $\mu_{\Gamma}(0)$ 和 $\mu_X(1)$, 由 μ_H 数据并不能直接给出 $\mu_{\Gamma}(1)$ 或 $\mu_X(0)$ 更不用说它们在任意组分下之值。此外,更令人困惑的是,不知道如何从实验数据中分离出 μ_L 之值。

最近, Lee 及其合作者^[4]为了从电学参数的分析中获得 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的带边参数,讨论了各能谷电子迁移率随组分的变化。由于各能谷迁移率的具体计算涉及晶格散射(其中包括极性光学声子散射,畸变势散射和压电散射)、电离杂质散射、空间电荷区散射,谷间散射及合金散射。而这些散射机构中包含着许多未知参数,使得具体计算非常复杂,不得不引进许多近似假设。应当说,这种计算对于了解各能谷中各种散射机构的相对重要性是必不可少的。但对于系统分析迁移率随组分的变化并非理想的处理方法。

现提出一种简便而有效的内插法,在这一方法中,计算参数可取自精确的实验值,因而既能包含最主要的散射机构,又不必对这些散射机构进行繁复的计算。更重要的是把这一内插法同三能谷模型所得到的迁移率表式(13)相结合,可简便地对 μ_H 的组分关系进行系统分析,而且允许从 μ_H 的实验数据中,分析出 μ_L , 这个方法基于对载流子电导率有效质量的线性内插:

$$m_{\alpha}^e(x) = (1-x)m_{\alpha}^e(0) + xm_{\alpha}^e(1), (\alpha = \Gamma, L, X), \quad (15)$$

其中 $m_{\alpha}^e(0)$ 和 $m_{\alpha}^e(1)$ 分别表示 GaAs 和 AlAs 导带 α 能谷的电导率有效质量,可按下列式计算:

$$\frac{1}{m_{\alpha}^e} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_{\alpha l}} + \frac{2}{m_{\alpha t}} \right) \quad (16)$$

式中 $m_{\alpha l}$ 和 $m_{\alpha t}$ 分别为 α 能谷的纵向和横向有效质量。于是三元合金第 α 能谷的迁移率与组分的关系可用组成它的两端纯化合物的迁移率表示,即表为迁移率倒数的线性内插:

$$\mu_{\alpha}(x) = \left(\frac{1-x}{\mu_{\alpha}(0)} + \frac{x}{\mu_{\alpha}(1)} \right)^{-1}, (\alpha = \Gamma, L, X) \quad (17)$$

其中 $\mu_{\alpha}(0) \equiv q \langle \tau \rangle_{\alpha} / m_{\alpha}^e(0)$ 是 GaAs α 能谷的迁移率, AlAs 的 $\mu_{\alpha}(1)$ 也有类似的表式。弛豫时间 $\langle \tau \rangle_{\alpha} = (\sum_i \tau_{\alpha i}^{-1})^{-1}$ 包含除合金散射以外的所有散射机构。根据迁移率随温度变化的测量结果^[18]和 Lee 等分析,^[4]在包括室温在内的相当宽的温度范围内, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 导带 Γ 和 X 能谷中最主要的散射机构是极性光学声子散射, L 能谷中还有谷间散射起支

配作用, 合金散射只对 $x > 0.5$ 的区域有影响, 而它并不是决定性的机构。我们注意到, 不同能谷中电子散射的弛豫时间是不同的, 即 $\langle \tau \rangle_{\Gamma} < \langle \tau \rangle_L$ 和 $\langle \tau \rangle_X$ 均不相等。但对于不同组分材料的同一能谷, 由于其等能面的形状相同, 可近似地认为 $\langle \tau \rangle_{\alpha}$ 与组分无关。在这情形下, $\mu_{\alpha}(0)$ 和 $\mu_{\alpha}(1)$ 之间有固定的比值, 它由能带结构决定。根据 Γ 能谷的有效质量 (见方程(8a)) 及 L 、 X 能谷的有关数据:

$$\begin{array}{ll} \text{GaAs: } m_{L\uparrow}(0) = 1.9m_0^{[14]} & \text{AlAs: } m_{L\uparrow}(1) = 1.32m_0^{[23]} \\ m_{L\downarrow}(0) = 0.0754m_0^{[19]} & m_{L\downarrow}(1) = 0.15m_0^{[22]} \\ m_{X\uparrow}(0) = 1.3m_0^{[20]} & m_{X\uparrow}(1) = 1.1m_0^{[23]} \\ m_{X\downarrow}(0) = 0.23m_0^{[21]} & m_{X\downarrow}(1) = 0.19m_0^{[23]} \end{array}$$

可由方程(15)和(16)得到 Ga_{1-x}Al_xAs 各能谷的电导率有效质量:

$$\begin{aligned} m_f^*(x)/m_0 &= 0.067 + 0.083x \\ m_L^*(x)/m_0 &= 0.111 + 0.102x \\ m_X^*(x)/m_0 &= 0.317 - 0.055x \end{aligned} \quad (18)$$

以及如下比值:

$$\begin{aligned} B_{\Gamma} &\equiv \mu_{\Gamma}(0)/\mu_{\Gamma}(1) = 2.239 \\ B_L &\equiv \mu_L(0)/\mu_L(1) = 1.919 \\ B_X &\equiv \mu_X(0)/\mu_X(1) = 0.826 \end{aligned} \quad (19)$$

由于 $\mu_{\Gamma}(0)$ 和 $\mu_X(1)$ 可取自精确的实验值, 因而 $\mu_{\Gamma}(x)$ 和 $\mu_X(x)$ 便相应地由方程(17)确定。根据以上分析, 我们得到霍尔迁移率与 Al 组分关系的解析表达式:

$$\mu_H(x) = r_H \mu_{\Gamma}(0) f_{\mu}(x) [1 + (B_{\Gamma} - 1)x]^{-1} \quad (20)$$

上式的多谷修正因子 $f_{\mu}(x)$ 中, $B_1(x)$ 和 $B_2(x)$ 分别为

$$B_1(x) = B_1(0) \frac{1 + (B_{\Gamma} - 1)x}{1 + (B_L - 1)x} \quad (21-a)$$

$$B_2(x) = B_2(0) \frac{1 + (B_{\Gamma} - 1)x}{1 + (B_X - 1)x} \quad (21-b)$$

其中 $B_1(0) = \mu_L(0)/\mu_{\Gamma}(0)$, $B_2(0) = \mu_X(0)/\mu_{\Gamma}(0)$, 因此公式(20)中, 只需用一个可调参数 $\mu_L(0)$, 它由这个方程与实验数据拟合决定。换言之, 可从 $\mu_H(x)$ 的实验确定 $\mu_L(x)$ 之值。

III、结 果 和 讨 论

A. 与实验结果的比较

图 3 表示理论与掺 Sn 的 Ga_{1-x}Al_xAs 样品的比较, 实验数据取自文献[3], 曲线 A, B 分别对应于 $\mu_L(0)$ 值的不同选择, 曲线 C 将在下面讨论。经进行掺 Te 的 Ga_{1-x}Al_xAs 样

品的实验测量^[18] (其中部分样品同文献[4]的样品有相似的工艺条件和掺杂量), 结果同理论曲线的比较如图4所示, 其中曲线A, B同样对应于不同的 $\mu_L(0)$ 值选择。计算参数列于表I, 其选取考虑到迁移率多谷修正因子的具体行为(见方程(14)及图5)。可以认为, 理论与实验结果的符合程度是满意的。

表 I 计算参数

曲 线		$\mu_r(0)$	$\mu_x(1)$	$\mu_L(0)$
		(cm ² /v.s)		
图 3	A	3200	205	1200
	B	3200	205	427
	C	3200	205	不考虑L带
图 4	A	2500	430	1200
	B	2300	430	920

当然, 实验点的分散性是可预料的, 因目前的材料工艺还无法保证每一片样品的实际掺杂量和外延层的晶格完整性等因素完全一致。尤其Al组分 $x > 0.7$ 的样品, 其晶格完整性更差些, 所以其迁移率数据出现更大的不确定性是正常的。实际上, AlAs的电子迁移率测量值大约在 $120\text{cm}^2/\text{v.s}$ ^[13]至 $1000\text{cm}^2/\text{v.s}$ ^[24]之间。鉴于这一情况以及当 $x > 0.6$ 时 $f_\mu(x) \rightarrow B_2$, 在图3和图4中, $\mu_x(1)$ 之值均选自 $x \sim 0.6$ 的样品。

我们发现, 与文献[3]实测数据拟合最好时的 $\mu_L(0)$ 值在 $1200\text{cm}^2/\text{v.s}$ 左右(见图3曲线A), 因而 $\mu_L(x)$ 大约在 $1200 \sim 630\text{cm}^2/\text{v.s}$ 之间变化。 $\mu_L(0)$ 之值同文献[3]所估计的 $400\text{cm}^2/\text{v.s}$ 差别较大, 这一差别可能缘于他们的压力实验和分析方法都无法分离出 $\mu_L(x)$ 数据, 因而在他们的估计中借用了GaSb的迁移率比值 $\mu_r/\mu_L \doteq 7.5$ Aspnes^[14]在分析高纯GaAs时, 也曾引用这个比率, 从而给出 $\mu_L(0)$ 数值的上限为 $1000\text{cm}^2/\text{v.s}$, 但实际上, 这个比值与材料的具体情形有关(主要由于 $\mu_r(0)$ 的差异), 不可能保持恒定不变。由图3的曲线B看出, 当用这个比率计算而取 $\mu_L(0) \sim 427\text{cm}^2/\text{v.s}$ 时, 同实验点有相当大的偏离。与此相反, 我们的分析方法放弃了这个比率不变的假设, 而把它作为可调参数处理, 并由实验确定。因此, 相信本文给出的 $\mu_L(0)$ 值是更加合理的。对另一组数据(图4)的分析也发现 $\mu_L(0)$ 在同一数值附近。

B. L能带的作用

最近的研究表明, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的L带对于施主电离能的确定起着重要作用。^[4,17] 本文进一步确认, 在 $0.15 < x < 0.6$ 组分区, L带对电子的霍尔迁移率因而对材料的电学性质也有明显影响。图3曲线C是忽略L带用 $\Gamma-X$ 二能谷模型计算的。同考虑L带的曲线A, B对比, 它在 $x \sim 0.35$ 附近的陡度较大, 偏离此组分两旁的实验值。而且这

个陡度随选取的 L 能谷迁移率 $\mu_L(0)$ 之值不同而变, 图 4 的曲线也有相同的行为。

L 带的参与使 Ga_{1-x}Al_xAs 体系的迁移率由 $\mu_\Gamma(0)$ 过渡到 $\mu_X(1)$ 的速率变慢之行为是容易理解的。因组分接近直接——间接交叉点时, L 带先后同 X 和 Γ 带发生交叉, 而且十分靠近 $\Gamma-X$ 交叉点 (见图 1)。由于各能带的相互作用, 电子在能谷间发生热转移而不断调整其占有数的百分比。同二能谷模型相比, L 带的引进势必使 Γ 带和 X 带的电子占有数有所降低, 利用方程 (6) (7) 和 (9), 三能谷模型的电子占有数 (用 n_0 归一化) 为:

$$n_\Gamma/n_0 = (1 + A_1 + A_2)^{-1} \quad (22-a)$$

$$n_L/n_0 = A_1(1 + A_1 + A_2)^{-1} \quad (22-b)$$

$$n_X/n_0 = A_2(1 + A_1 + A_2)^{-1} \quad (22-c)$$

室温下, 随 x 变化的曲线如图 6 所示。容易推出, 相对于二能谷模型, L 带使 Γ 和 X 能谷的占有数分别减少了

$$\frac{\Delta n_\Gamma}{n_0} = \frac{A_1}{(1 + A_2)(1 + A_1 + A_2)} \quad (23-a)$$

$$\frac{\Delta n_X}{n_0} = \frac{A_1 A_2}{(1 + A_2)(1 + A_1 + A_2)} \quad (23-b)$$

计算表明:

(i) 当 $x < 0.15$ 时, $1 \gg A_1 \gg A_2$,

(ii) 当 $x > 0.6$ 时, $1 \ll A_1 \ll A_2$,

(iii) 当 $0.15 < x < 0.6$ 时, A_1 与 A_2 同数量级或可以相比拟;

由此可见, 在情形 (i) 和 (ii), $\Delta n_\Gamma/n_0 \doteq \Delta n_X/n_0 \doteq 0$, L 带的影响可以忽略, 这时三能谷模型自动简化为二能谷模型的结果。但在情形 (iii), $\Delta n_\Gamma/n_0$ 和 $\Delta n_X/n_0$ 却不可忽视。由于 L 带的迁移率数值介于 Γ 带和 X 带之间, 因此在 Γ 能谷起决定作用的组分区, 其电子的减少将使表观迁移率下降, 而对于 X 能谷起决定作用的组分区, 其电子的减少则表现为迁移率上升。

C. $\mu_\Gamma(x)$, $\mu_L(x)$ 和 $\mu_X(x)$ 的行为

关于各能谷迁移率的组分关系至今了解甚少, 因尚无实验可将其分开或进行单独测量。本文的分析表明, 可按方程 (17) 描述的方式内插, 或写成

$$\mu_\alpha(x) = \mu_\alpha(0) [1 + (B_\alpha - 1)x]^{-1}, (\alpha = \Gamma, L, X) \quad (24)$$

其中 B_α 是能带结构决定的, $\mu_\alpha(0)$ 则与材料及具体散射机构有关。对于 Ga_{1-x}Al_xAs, 由于 B_Γ 和 B_L 皆大于 1, 而 $B_X < 1$, 所以 $\mu_\Gamma(x)$ 与 $\mu_L(x)$ 是 x 的单调递减函数, 而 $\mu_X(x)$ 是单调上升函数。如图 3 和图 4 所示。这个行为主要反映有效质量的变化, 并使 μ_H 曲线的两端都不是水平的直线。这个变化趋势同 Lcc 等^[4] 的计算对比, μ_Γ 和 μ_X 的结果相似, 而 $\mu_L(x)$ 的变化趋势则明显不同。他们的计算结果随 x 增大时 μ_L 先下降后

上升, 在 $0.35 < x < 0.4$ 区域存在极小值, 并认为这是带间散射所引起的效应。

此外, K. Kaneko 等^[2]为了用二能谷模型解释其实验结果, 曾给出如下的 $\mu_{\Gamma}(x)$ 经验表式:

$$\mu_{\Gamma}(x) = (1/5 \times 10^3 + x/8.2 \times 10^2)^{-1}, \quad (\text{cm}^2/\text{v.s}) \quad (25)$$

式(25)与上述方程(24)一致。用我们的方法相当于取 $\mu_{\Gamma}(0) = 5000 \text{cm}^2/\text{v.s}$ $B_{\Gamma} \doteq 7.1$ 。由于他们忽略了 L 带的作用, 为使 μ_H 的二能谷理论曲线在 $x < 0.3$ 的区域较快下降, 以拟合实验值, 势必不恰当地提高 B_{Γ} 值, 我们曾指出, 由 Γ 能谷有效质量比所给出的 $B_{\Gamma} \sim 2.24$ 。事实上, 用我们的方程(20), 同样可满意地拟合 Kaneko 的数据, 并避免了上述矛盾。

IV、结 论

用导带 Γ - L - X 三能谷模型和能谷迁移率内插所建立起来的半经验方法, 可有效而简便地分析三元半导体合金霍尔迁移率随组分变化的规律, 且允许从霍尔迁移率的实验数据中分析出 L 能谷迁移率的值。发现 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的 $\mu_L(x)$ 在 $1200 \sim 630 \text{cm}^2/\text{v.s}$ 之间变化。

导带各能谷电子迁移率随 x 变化的趋势主要由能带结构决定。 $\mu_H(x)$ 曲线两端的斜率分别取决于 $\mu_{\Gamma}(x)$ 和 $\mu_X(x)$ 的形式, 在 $0 \leq x < 0.15$ 和 $0.6 < x \leq 1$ 组分区, L 能谷对霍尔迁移率的影响可略, 但在 $0.15 < x < 0.6$ 范围内, L 能谷有明显的影响, 它使霍尔迁移率由 μ_{Γ} 过渡到 μ_X 的速率变慢。这个效应可用 Γ 能谷和 X 能谷的电子占有数因 L 能谷作用而减小来说明。

本工作得到吴伯儒教授和教研室的支持, 黄景昭、胡志萍和戴炎鸿同志参加了样品的制备和测量工作, 作者深表感谢。

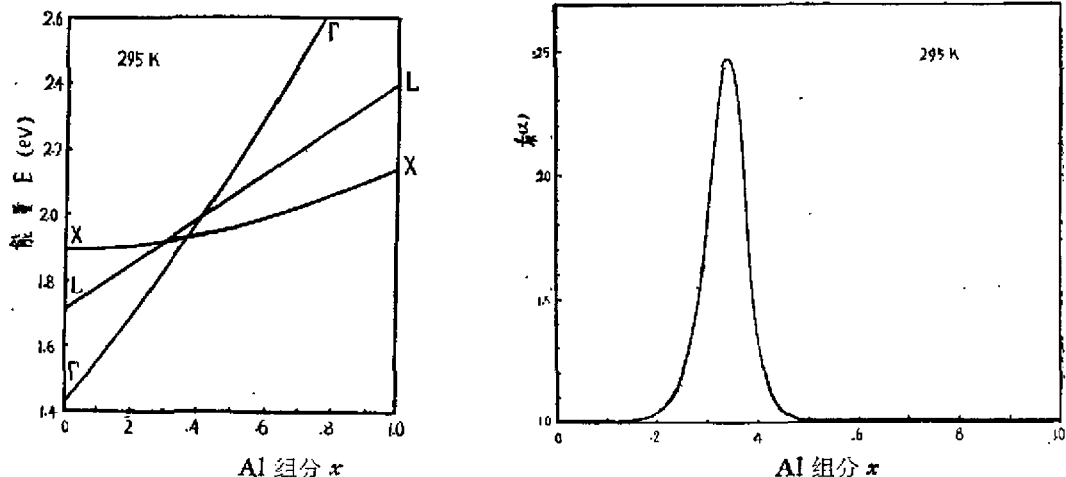


图 1. $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的导带, 曲线由(2)式给出。图 2. $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 霍尔系数多谷修正因子的室温值。

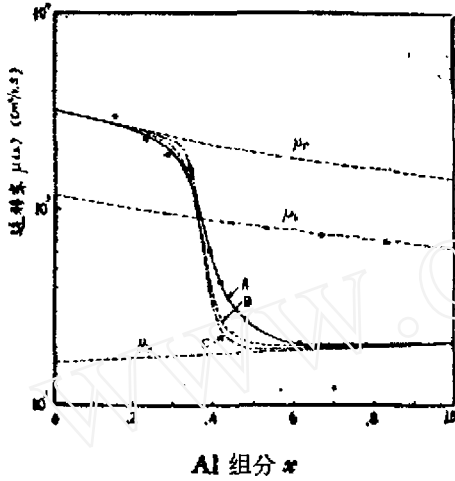


图3 理论与 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}:\text{Sn}$ 实验的比较: 实验点取自文献[3] $\mu_H(x)$ 的曲线 A, B, C 的计算参数见表 I。

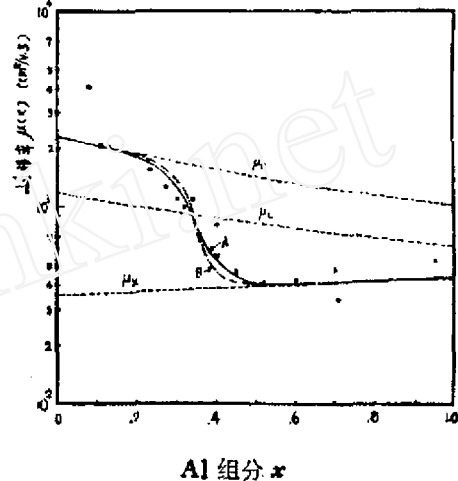


图4 理论与 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}:\text{Tc}$ 实验的比较, 实验点取自文献[4], ×取自文献[18], $\mu_H(x)$ 曲线的计算参数见表 I。

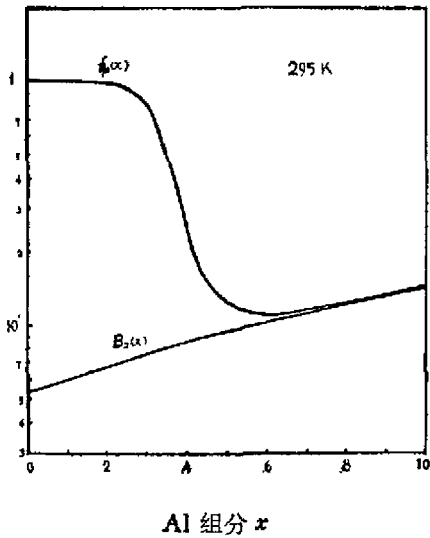


图5 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 迁移率多谷修正因子 $f_\mu(x)$ 的行为。 $x < 0.15$ 时, $f_\mu(x) \rightarrow 1$; $x > 0.6$ 时, $f_\mu(x) \rightarrow B_2(x)$ 。

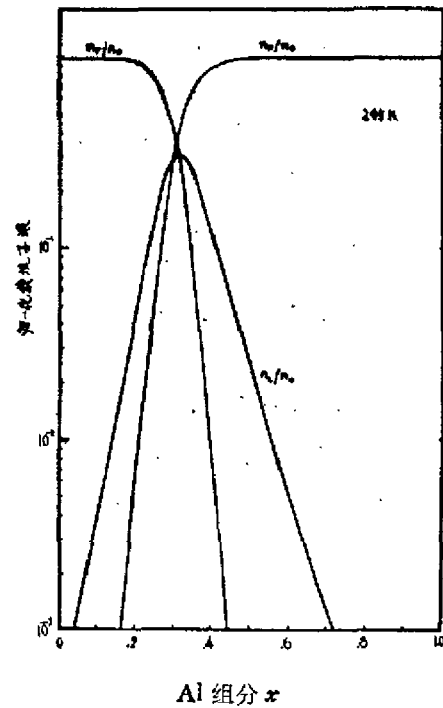


图6 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 中 Γ, L, X 三能谷中的室温载流子浓度。三条曲线按方程(22)计算, L 能谷载流子浓度极大值出现在 $x \sim 0.32$ 。

参 考 文 献

- [1] SpringThorpe. A. J., etal., *J. Electronic Materials.*, 4 (1975), 101.
- [2] Kaneko. K. etal., *Inst. Phys. Conf. Ser.*, No 33a (1977) 216.
- [3] Lifshitz. N., etal., *Phys. Rev.*, B21(1980) 670.
- [4] Lee. H. J., etal., *Phys. Rev.*, B21 (1980) 959.
- [5] Dingle. R., etal., *Inst Phys. Conf. Ser.*, No 33a(1977) 210.
- [6] Monemar. B., etal, *J. Appl. Phys.*, 47(1976) 2604.
- [7] Temkin. H., etal., *J. Appl. Phys.*, 51(1980) 3269.
- [8] Rodc. D. L., *J. Appl Phys.*, 45 (1974) 3887.
- [9] Casey. H. C. Jr., *J. Appl. Phys.*, 49 (1978) 3684.
- [10] Casey. C., etal., *J. Appl. Phys.*, 40 (1969) 4910.
- [11] Berolo. O., etal., *Can. J. Appl. Phys.*, 49 (1971) 1335.
- [12] Baldereschi, A., etal., *J. Phys. C* 10 (1977) 4709.
- [13] Aspnes. D. E., *Phys. Rev.*, B14 (1976) 533.
- [14] Monemar. B., *Phys. Rev.*, B8 (1973) 5711.
- [15] Stukel. D. J., etal., *Phys. Rev.*, 188 (1969) 1193.
- [16] Lorenz. M. R., etal., *Solid State Comm.* 8 (1970) 693.
- [17] 黄美纯, 发并与显示, (1980) 2, 11.
- [18] 黄景昭、胡志萍、黄美纯, 第二届全国发光会报告资料(1980).
- [19] Aspnes. D. E., etal., *Phys. Rev.*, B7 (1973) 4605.
- [20] Conwell, E. M., etal., *Phys. Rev.*, 166(1968) 797.
- [21] Pollak. F. H. etal., *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.*, 21 (1966) 20.
- [22] Hess. E., etal., *Phys. Status Solidi.*, B55 (1973) 187.
- [23] Rheinlander. B., etal., *Phys. Status Solidi.*, B49 (1972) K167.
- [24] Pankove. J. I., *Optical Processes in Semiconductors.*, 1971.

Hall Mobility and Band Structure of n-Ga_{1-x}Al_xAs Alloys

Huang Meichun

(Department of Physics)

Abstract

In this paper, a new semiempirical method for the compositional dependence analysis of electron Hall mobility in ternary semiconductor alloys is presented. Dependence of Hall mobility in Ga_{1-x}Al_xAs on the band structure at room temperature is described in detail. Theoretical calculations of Hall mobility as a function of composition have been made on three-valley (Γ -L-X) model and an interpolation of valley-electron mobility. It is shown that L-band plays a significant part in Hall mobility in the composition range $0.15 < x < 0.6$. The variation rate of Hall mobility near the direct-indirect energy gap cross composition is decreased under the action of L-band. By using the L-valley electron mobility as an adjustable parameter, theoretical curves are in good agreement with experimental data for n-Ga_{1-x}Al_xAs at room temperature, if setting $\mu_L(0) \sim 1200 \text{ cm}^2/\text{v.s.}$