

$n\text{-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的能带结构和Hall迁移率

黄美纯

(厦门大学物理系)

1981年12月20日收到

摘 要

本文提出一种分析三元半导体合金霍尔迁移率随组分变化的半经验方法。详细描述了GaAlAs电子迁移率变化与能带结构的关系。在导带 Γ -L-X三能谷模型的基础上,引进能谷迁移率内插法,给出了霍尔迁移率随组分变化的理论公式,对GaAlAs进行具体计算发现同现有的实验结果符合得很好。理论曲线与实验的拟合采用L带电子迁移率作为可调参数。研究表明,至今了解很少的L带迁移率在 $1200\sim 600\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 之间变化,同时确认,在 $0.15 < x < 0.6$ 的Al组分区,L带对霍尔迁移率起着重要作用,它使迁移率由 Γ 带之值过渡到X带之值的速率变慢。

一、引 言

三元半导体合金 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 是一种应用极广的光电子材料。近年来,人们已对它的电学和光学性质进行过许多研究^[1-7]。在发光二极管、半导体激光器和太阳能电池等重要技术应用的设计中,了解它们的带隙、载流子浓度和迁移率等参数与Al组分 x 之间的关系是非常重要的。因为带隙决定了发光的波长;载流子在各能带中的分布直接影响到发光器件的内量子效率;而载流子迁移率在结型器件中则始终是决定器件性能的一个重要因素。所有这些量在 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 系统中都由Al组分所控制。如何在设计此类器件时兼顾发光波长的选择,降低电流阈值,提高发光效率和延长使用寿命等等,都必须对这些参数有深入的了解^[8,9]。

最近Kaneko等^[2]测量了掺Sn的 $n\text{-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的霍尔迁移率,并用 Γ -X二能谷模型和一组经验参数解释了他们的实验结果。但他们的研究没有考虑L能带的影响,也忽略了X带中电子迁移率与组分的关系。Lifshitz等^[3]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Al组分的关系由于缺乏各能谷中随组分变化的知识,也没有进行直接的分析。Lee等^[4]通过霍尔系数和电导率的测量分析了 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 导带三个能谷的带边方程,并计算了各能谷中各种散射机构的相对重要性,但他们的方法不适宜于对迁移率与 x 的关系进行系统分析。

本文提出一种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 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的计算。它基于对各能谷电子迁移率的内插和导带的 Γ -L-X三能谷模型。给出的 $\mu_H(x)$ 理论公式适合于整个组分区,而且只包含一个与L能带有关的可调参数。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,可以使理论曲线同所有已发表的实验数据符合,并且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,因而对电学性质有重要贡献。

二、霍尔迁移率的分析

A. $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的导带参数

为了分析迁移率与能带结构参数之间的关系，应确定 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的导带参数。关于 $E_{\Gamma}(x)$ 和 $E_{\text{X}}(x)$ ，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。但已报告的数据有很大的分散性，不同方法所确定的直接—间接交叉组分值 x_0 大约在 0.34 至 0.45 之间，交叉点能量 $E(x_0)$ 的分散性达 150 meV。Baldereschi 等^[12]，用经验势法及推广的 VCA 方法所计算的 x_0 理论值甚至小至 0.31。但不管怎样，绝大多数研究认为 Γ 和 X 带边可以用组分 x 的二次式近似来描写，即用 GaAs 和 AlAs 的带隙值及一个相应的弯曲参数 b 表为

$$E_{\alpha}(x) = E_{\alpha}(0) + [E_{\alpha}(1) - E_{\alpha}(0) - b_{\alpha}]x + b_{\alpha}x^2 \quad (1)$$

其中角标 $\alpha = \Gamma, L, X$ 。对于 L 带边的变化还很少了解，为简单起见通常采用线性近似，即取 $b_L = 0$ ，而对于 b_{Γ} 和 b_X 可以利用 Γ —X 交叉的典型值 $x_0 = 0.37$ 和 $E(x_0) = 1.94\text{eV}$ 及 Aspnes^[13] 给出的 $E_{\Gamma}(0)$ ， $E_L(0)$ ， $E_X(0)$ 之低温值内插到室温，AlAs 的室温参数取 $E_{\Gamma}(1) = 3.03\text{eV}$ ^[14]， $E_L(1) = 2.4\text{eV}$ ^[15] 和 $E_X(1) = 2.16\text{eV}$ ^[16]，求得 $b_{\Gamma} = 0.338$ ， $b_X = 0.244$ 或由方程 (1) 得到

$$\begin{aligned} E_{\Gamma}(x) &= 1.425 + 1.267x + 0.338x^2 \\ E_L(x) &= 1.709 + 0.691x \\ E_X(x) &= 1.901 + 0.015x + 0.244x^2 \end{aligned} \quad (2)$$

作者曾用方程 (2) 计算 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 中的施主杂质电离能的组分关系并与文献 [1] 的实验结果一致^[17]。由此给出的能带结构如图 1 所示。图中各能带边的交叉点为

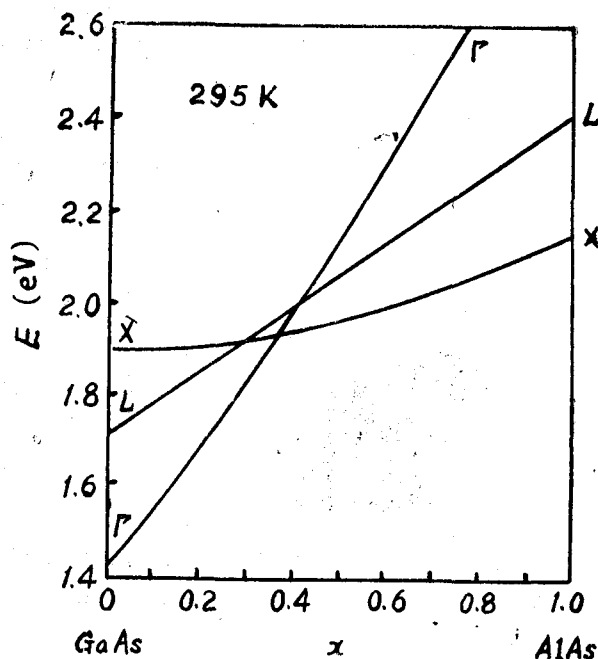


图 1 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的 Γ ，L，X 带边随 Al 组分 x 变化，曲线由方程 (2) 给出

L-X:	x = 0.321	E _{L-x} = 1.931eV
Γ-X:	x _c = 0.370	E _{Γ-x} = 1.940eV
Γ-L:	x = 0.399	E _{Γ-L} = 1.985eV

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他们的低约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三个能谷中, 因此霍尔系数R_H和电导率σ必须计及这三个能谷的贡献。显然

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

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

其中q是电子电荷, γ_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x的函数。室温时只需考虑n_α随x的变化, n₀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能谷状态密度有效质量。对于L和X能谷必须分别包括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到^[9]:

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

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

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

定义如下四个无因次的参数

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

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

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

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

这些参数的意义是明显的。在此考虑到不同能谷中电子的散射机构有相似的温度关系, 这使得参数B₁和B₂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A₁和A₂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

$$\begin{aligned}\Delta E_1(x) &= E_L(x) - E_\Gamma(x) \\ \Delta E_2(x) &= E_X(x) - E_\Gamma(x)\end{aligned}\quad (10)$$

其室温值由方程(2)给出。利用(9)式,霍尔系数和电导率分别可以表示为

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

$$f_R(x) = \frac{(1+A_1B_1^2+A_2B_2^2)(1+A_1+A_2)}{(1+A_1B_1+A_2B_2)^2} \quad (11b)$$

$$\sigma = qn_0 \mu_r(x) f_\sigma(x), \quad (12a)$$

$$f_\sigma(x) = \frac{1+A_1B_1+A_2B_2}{1+A_1+A_2} \quad (12b)$$

因此,霍尔迁移率为

$$\mu_H(x) = \gamma_H \mu_r(x) f_\mu(x), \quad (13a)$$

$$f_\mu(x) = \frac{1+A_1B_1^2+A_2B_2^2}{1+A_1B_1+A_2B_2} \quad (13b)$$

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。它们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。对于多谷的三元半导体化合物,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 , 在其它组分下, $f_R(x) > 1$, 图2给出了 295K 时的 $f_R(x)$ 曲线, 其值在 $1 \sim 2.47$ 之间变化, 极大值出现在 $x \sim 0.34$ 。对于 $f_R(x) > 1$ 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 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, 它们皆小于 1 , 并且容易证明:

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

这说明随着 Al 组分由 $x = 0$ 变为 $x = 1$ 时, 测量到的电导率和霍尔迁移率将由 GaAs 之值过渡到 AlAs 之值。

为了计算 $\mu_H(x)$, 还要知道各能谷中电子迁移率如何随组分变化。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_r 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, $\mu_H(x) \doteq \mu_r(x)$, 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 $\mu_r(0)$ 和 $\mu_x(1)$ 。从 μ_H 的数据并不能直接给出 $\mu_r(1)$ 或 $\mu_x(0)$, 更不能给出它们在任意组分下之值。此外, 更加令人困惑的是, 不知道如何从实验数据中分离出 $\mu_L(x)$ 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, 这使得具体计算不仅非常复杂, 而且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

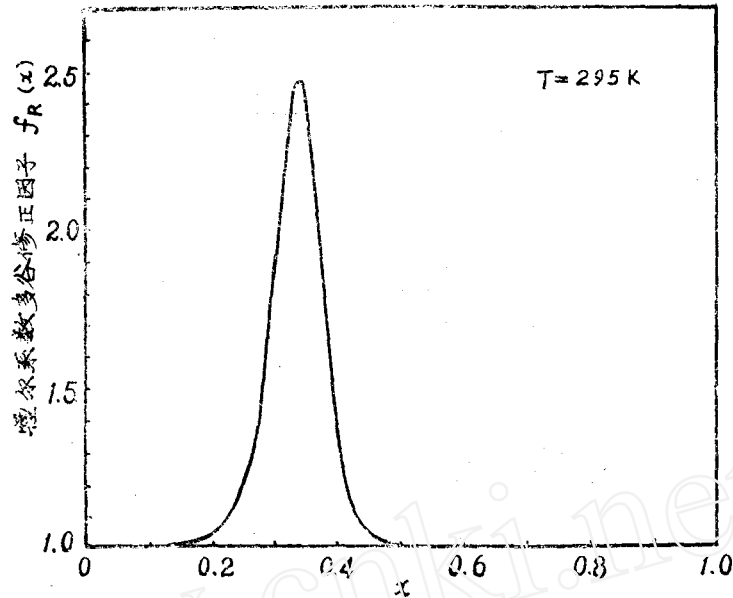


图 2 霍尔系数多谷修正因子的室温值

不可少的, 但对于系统分析迁移率随组分的变化, 并不是理想的处理方法。

本文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, 因而既能包括最主要的散射机构, 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达式(13)相结合, 就能十分简便地对 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:

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

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来表示, 即表为迁移率倒数的线性内插:

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

其中 $\mu_\alpha(0) \equiv q \langle \tau \rangle_\alpha / m_\alpha^e(0)$ 是 GaAs 第 α 能谷的迁移率, AlAs 的 $\mu_\alpha(1)$ 也有类似的表式。弛豫时间 $\langle \tau \rangle_\alpha = (\Sigma \tau_i^{-1})^{-1}$, 它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^[10] 和 Lee 及其合作者的分析^[11], 在包含室温在内的相当宽的温度范围内, Ga_{1-x}Al_xAs 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, 合金散射对 $x > 0.5$ 的区域有些影响, 但不是决定性的机构。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, 可以近似地认为 $\langle \tau \rangle_\alpha$ 与组分无关。在这种情形下, $\mu_\alpha(0)$ 和 $\mu_\alpha(1)$ 之间有固定的比值, 它由能带结构决定。根据表 I 的有关数据可以由方程

(15) 和 (16) 得到 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 各能谷的电导率有效质量:

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

及如下比值:

$$\begin{aligned} B_r &\equiv \mu_r(0)/\mu_r(1) = 2.239 \\ B_L &\equiv \mu_L(0)/\mu_L(1) = 1.919 \\ B_x &\equiv \mu_x(0)/\mu_x(1) = 0.826 \end{aligned} \quad (19)$$

表 I 有效质量

GaAs	AlAs
$m_r(0) = 0.067m_0$	$m_r(1) = 0.15m_0$
$m_{L1}(0) = 1.9m_0^{[14]}$	$m_{L1}(1) = 1.32m_0^{[22]}$
$m_{L2}(0) = 0.0754m_0^{[19]}$	$m_{L2}(1) = 0.15m_0^{[22]}$
$m_{x1}(0) = 1.3m_0^{[20]}$	$m_{x1}(1) = 1.1m_0^{[23]}$
$m_{x2}(0) = 0.23m_0^{[21]}$	$m_{x2}(1) = 0.19m_0^{[23]}$

由于 $\mu_r(0)$ 和 $\mu_x(1)$ 可取自精确的实验值, 因而 $\mu_r(x)$ 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:

$$\mu_H(x) = \gamma_H \mu_r(0) f_H(x) [1 + (B_r - 1)x]^{-1} \quad (20)$$

上式的多谷修正因子 $f_H(x)$ 中, $B_1(x)$ 和 $B_2(x)$ 分别为,

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

$$B_2(x) = B_2(0) \frac{1 + (B_r - 1)x}{1 + (B_x - 1)x} \quad (21b)$$

其中 $B_1(0) = \mu_L(0)/\mu_r(0)$, $B_2(0) = B_x \mu_x(1)/\mu_r(0)$ 。因此在我们的理论公式 (20) 中, 只需要用一个可调参数 $\mu_L(0)$ 。它由这个方程与实验数据拟合决定。换句话说, 本分析方法可用于从 $\mu_H(x)$ 的实验确定 $\mu_L(x)$ 值。

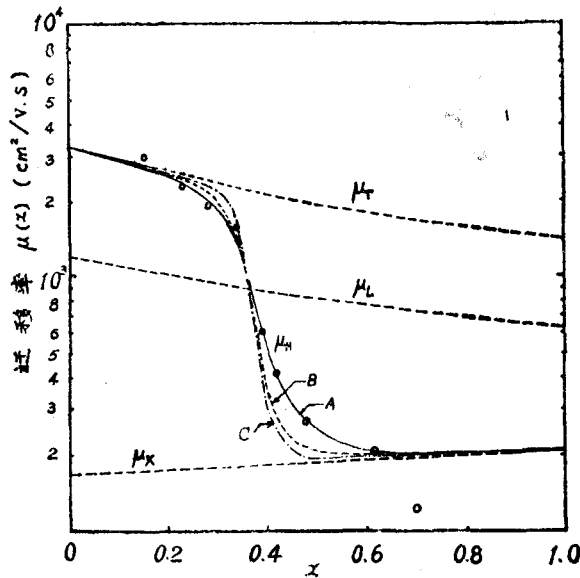


图 3 理论与 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}:\text{Sn}$ 实验的比较, 实验点取自文献 [3], $\mu_H(x)$ 曲线 A, B, C 的计算参数见表 I

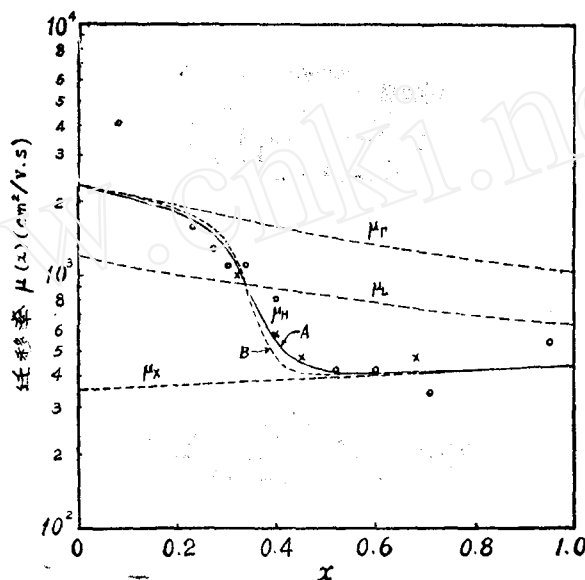
三、结果和讨论

A. 与实验结果的比较

图3表示理论与掺Sn的 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 样品的比较。实验数据取自文献 [3], 曲线A、B分别对应于 $\mu_L(0)$ 的不同选择, 曲线C将在下面讨论。我们进行了掺Te的 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 样品的实验测量 [23], 其中部份样品同文献 [4] 的样品有相似的工艺条件和掺杂量, 这些结果同理论曲线的比较示于图4。图中曲线A、B同样对应于不同的 $\mu_L(0)$ 值选择。这些曲线的计算参数列于表 I。参数的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令人满意的。

表 I 计算参数

曲线	$\mu_r(0)$	$\mu_x(1)$ ($\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$)	$\mu_L(0)$	
图 3	A	3200	205	1200
	B	3200	205	427
	C	3200	205	不考虑 L 带
图 4	A	2300	430	1200
	B	2300	430	920

图 4 理论与 Ga_{1-x}Al_xAs:Te 实验的比较, 实验点“o”取自文献[4]

“x”取自文献[18], $\mu_H(x)$ 曲线计算参数见表 I.

当然, 实验点的分散性是可以预料到的。因为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, 所以这一区域的迁移率数据出现更大的不确定性是不奇怪的。实际上, AlAs 的室温电子迁移率测量值大约在 $120\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ ^[3] 至 $1000\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ ^[2,4] 之间。鉴于这一情况以及当 $x > 0.6$ 时 $f_r(x) \rightarrow B_2$, 在图 3 和图 4 中, $\mu_x(1)$ 之值都选自 $x \sim 0.6$ 的样品。

我们发现, 与文献[3]实测数据拟合最好时的 $\mu_L(0)$ 之值在 $1200\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ 左右 (见图 3 曲线 A)。因而 $\mu_L(x)$ 大约在 $1200 \sim 630\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ 之间变化。 $\mu_L(0)$ 之值同文献[3]的作者们所估计的 $\sim 400\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ 有较大差别。这可能是由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 $\mu_r/\mu_L = 7.5$ 。Aspnes^[6,4] 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 $1000\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ 。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 可以看出, 当用这个比率计算而取 $\mu_L(0) \sim 427\text{cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ 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

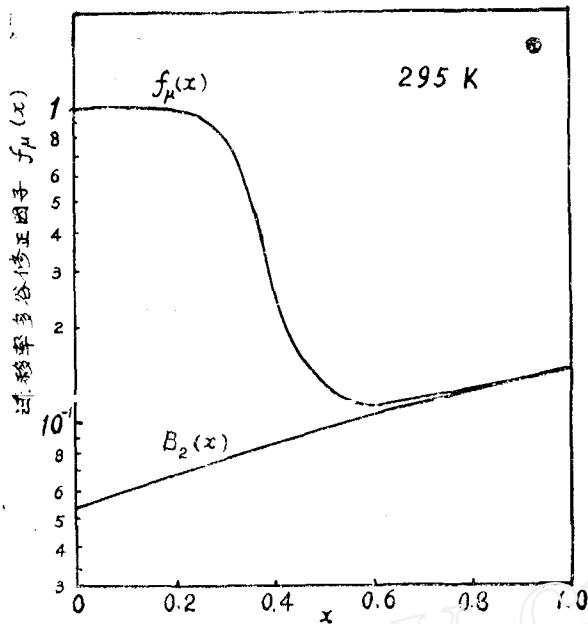


图5 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 迁移率多谷修正因子 $f_\mu(x)$ 的行为, $x < 0.15$ 时, $f_\mu(x) \rightarrow 1$; $x > 0.6$ 时, $f_\mu(x) \rightarrow B_2(x)$

L带先后同X和 Γ 带发生交叉,而且十分靠近 Γ -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),三能谷模型电子占有数(用 n_0 归一化)为

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

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

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

室温下,它们随 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带的占有数分别减少了:

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

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

具体计算表明,

(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), $\Delta n_\Gamma/n_0 \approx \frac{\Delta n_X}{n_0} \approx 0$, 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 $\Delta n_X/n_0$ 都是不可忽视的。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现迁移率下降,而对

分析也发现 $\mu_L(0)$ 在同一数值附近。

B. L能带作用

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][11]}。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的影响。图3曲线C是忽略L带用 Γ -X二能谷模型计算的。同考虑L带的曲线A、B对比,它在 $x \sim 0.35$ 附近陡度较大,偏离此组分两旁的实验值,而且这个陡度随着所选取的L能谷迁移率 $\mu_L(0)$ 之值不同而变化,图4的曲线也有相同的行为。

L带的参与使 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 体系的迁移率由 $\mu_L(0)$ 过渡到 $\mu_X(1)$ 的速率变慢这一行为是容易理解的。因为组分接近直接-间接交叉点时,

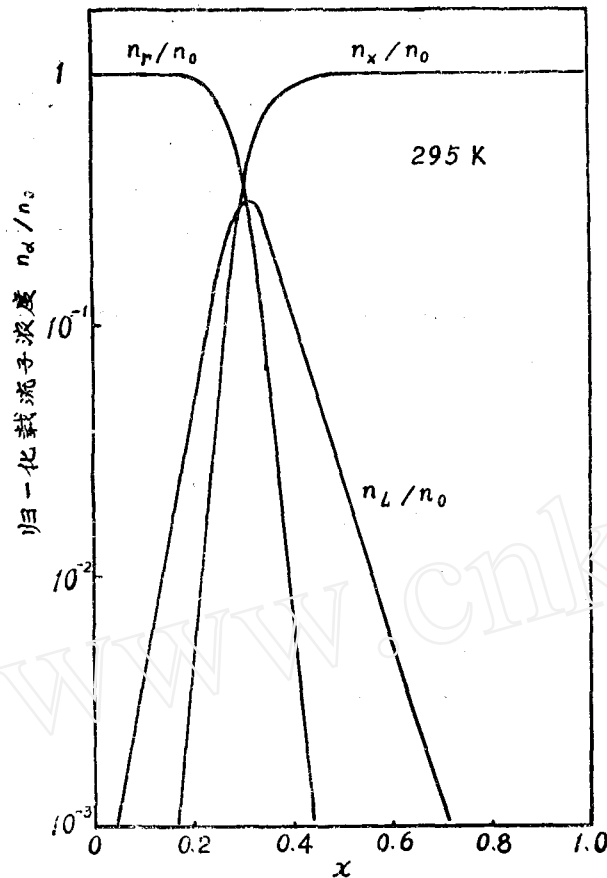


图6 Ga_{1-x}Al_xAs 中Γ、L、X 三能谷中的室温载流子浓度。三条曲线都按方程(22)计算, L 能谷载流子浓度极大值出现在 x ~ 0.32

0.35 < x < 0.4 区域有一个极小值, 并认为这是带间散射所引起的效应。

此外, Kaneko等^[2]为了用二能谷模型解释其实验结果, 曾给出如下的 μ_r(x) 经验表达式:

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

这一经验关系与上述方程(24)一致, 用我们的方法相当于取 μ_r(0) = 5000 cm²/v·s, B_r = 7.1。由于他们忽略了L带的作用, 为使 μ_r的二能谷理论曲线在 x < 0.3 的区域能较快地下降, 以拟合实验值, 势必不恰当地提高 B_r 值。前面曾指出, 由Γ能谷有效质量比所给出的 B_r ~ 2.24。事实上, 用我们的方程(20), 同样可以满意地拟合Kaneko的数据, 同时避免了上述矛盾。

四、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, 可以简便而有效地用于分析三元半导体合金霍尔迁移率随组分变化的规律。具体应用于Ga_{1-x}Al_xAs的分析说明理论同现有的实验数据都能满意地符合。同时, 本方法允许从霍尔迁移率的实验数据中

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的上升。

C. μ_r(x), μ_L(x) 和 μ_X(x) 的行为

关于各能谷迁移率的组分关系至今了解甚少, 因为还没有实验能把它它们分开或进行单独测量。本文的分析表明它们可以按方程(17)所描述的方式内插, 或重新写成

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

其中 B_α 之值由能带结构决定(见方程(19)), μ_α(0) 则与材料及具体散射机构有关。对于 Ga_{1-x}Al_xAs, 由于 B_r 和 B_L 皆大于 1, 而 B_X < 1, 所以 μ_r(x) 与 μ_L(x) 是 x 的单调递减函数, 而 μ_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_r 曲线的两端都不是水平的直线。这个变化趋势同 Lee 及其合作者^[4]的计算对比, μ_r 和 μ_X 的结果是相似的, 但 μ_L(x) 的变化趋势有明显不同。他们的计算结果随 x 增大 μ_L 先下降然后上升, 在

分析出至今了解甚少的L能谷迁移率的值,我们发现, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的 $\mu_L(x)$ 在 $1200\sim 600\text{ cm}^2/\text{v}\cdot\text{s}$ 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 $\mu_r(x)$ 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以忽略不计,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_r 过渡到 μ_x 的速率变慢。这个效应可以用 Γ 和 X能谷的电子占有数因L能谷的作用而减小来说明。

作者对吴伯僖教授及教研室许多同志的关心和鼓励,特别是黄景昭,胡志萍和戴炎鸿同志在样品制备,测量方面的全力合作深表谢意。

参 考 文 献

- [1] Spring Thorpe, A.J. et al., J. Electronic Materials, 4 (1975), 101.
- [2] Kaneko, K. et al., Inst. phys. Conf. Ser., No 33a (1977), 216.
- [3] Lifshitz, N. et al., phys. Rev., B21 (1980), 670.
- [4] Lee, H.J. et al., phys. Rev., E21 (1980), 659.
- [5] Dingle, R. et al., Inst. phys. Conf. Ser., No 33a (1977), 210.
- [6] Monemar, B. et al., J. Appl. phys., 47 (1976) 2604.
- [7] Temkin, M. et al., J. Appl. phys., 51 (1980) 3269.
- [8] Rode, D.L., J. Appl. phys., 45 (1974), 3887.
- [9] Casey, H.C. Jr., J. Appl. phys., 49 (1978), 3684.
- [10] Casey, C., J. Appl. phys., 40 (1969), 4910.
- [11] Berolo, O. et al., Can. J. Appl. phys., 49 (1971), 1335.
- [12] Baldereschi, A. et al., J. Phys., C 10 (1977), 4709.
- [13] Aspnes, D.E., Phys. Rev., B14 (1976), 5331.
- [14] Monemar, B., Phys. Rev., B 8 (1973), 5711.
- [15] Stukel, D.J. et al., Phys. Rev., 188 (1969), 1193.
- [16] Lorenz, M.R. et al., Solid State Comm., 8 (1970), 693.
- [17] 黄美纯, 发光与显示, 2 (1980), 11.
- [18] 黄景昭、胡志萍、黄美纯, 第二届全国发光学术会议报告资料, (1980) .
- [19] Aspnes, D.E. et al., Phys. Rev., B7 (1973), 4605.
- [20] Conwell, E.M. et al., Phys. Rev., 166 (1968), 797.
- [21] Pollak, F.H. et al., J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 21 (1966), 20.
- [22] Hess, E. et al., Phys. Status Solidi., B 55 (1973), 187.
- [23] Rheinlande, Br., Phys. Status Solidi., B 49 (1972), K167.
- [24] Pankove, J.I., Optical Processes in Semiconductors, 1971.