

Charakteryzacja wielokanałowego transportu nośników ładunku dla epitaksjalnych struktur półprzewodnikowych

Streszczenie. W pracy zwrócono uwagę na potrzebę rozwoju technik do precyzyjnego parametryzowania wielokanałowego transportu nośników ładunku, mających fundamentalne znaczenie dla efektywnego projektowania przyrządów półprzewodnikowych. Przedstawiono aktualny stan rozwoju tych technik pomiarowych w Wojskowej Akademii Technicznej, oraz przykładowe rezultaty dla struktur półprzewodnikowych, otrzymanych techniką epitaksji z wiązek molekularnych (MBE).

Abstract. The paper highlights the need to develop techniques for the precise parameterization of multi-channel charge carrier transport, which are of fundamental importance for the effective design of semiconductor devices. The current state of development of these measurement techniques at the Military University of Technology is presented, as well as exemplary results for semiconductor structures obtained by molecular beam epitaxy (MBE). (*Characterization of multi-channel charge carrier transport for epitaxial semiconductor structures*).

Słowa kluczowe: analiza widma ruchliwości, struktury epitaksjalne, półprzewodniki wąskoprzerwowe, przewodność.

Keywords: mobility spectrum analysis, epitaxial structures, low-bandgap semiconductors, conductivity.

Wstęp

W numerycznych symulacjach służących do projektowania profili energetycznych przyrządów półprzewodnikowych (ang. „*band-gap engineering*”) a także dla obliczeń transportu nośników ładunku, użytkownik natrafia zawsze na etap związany ze zdefiniowaniem warunków początkowych. W tej fazie przygotowawczej przed właściwą symulacją, należy rozwiązać problem poprawnego wyboru zarówno modeli fizycznych dla materiałów jak i dobrze uzasadnionych parametrów do zakładanych warunków symulacji [1]. Poza krzemem, germanem i kilkoma gruntownie przebadanymi półprzewodnikami, zadanie to nie jest proste – o ile celem jest uzyskanie precyzyjnych wyników ilościowych. Problem ten wynika w znacznej mierze z rozbieżności pomiędzy często stosowanymi modelami materiałów dla kryształów idealnych a parametrami rzeczywistych kryształów na aktualnym etapie rozwoju technologii. Aby zbudować najprostsz model tylko dla jednego z materiałów składowych heterostruktury, należy znać kilkadziesiąt wartości i funkcji odwzorowujących rzeczywiste parametry takie jak: masy efektywne, powinowactwo, odległości między pasmami energetycznymi, ruchliwości, czy zestaw wartości dla stanów Shockley-Read-Hall’a (SHR) [2]. W bardziej złożonych modelach, gdzie zakładamy np. transport nośników poprzez większą ilość pasm energetycznych, ilość potrzebnych parametrów początkowych i funkcji gwałtownie rośnie.

Częściowym rozwiązaniem problemu dużej ilości parametrów materiałowych jest zastosowanie modeli mieszanych, gdzie część danych pochodzi z obliczeń teoretycznych a część z aproksymowanych danych eksperymentalnych. Przykładowo, zamiast budować zaawansowane modele ruchliwości nośników i łączyć je poprzez kwestionowaną ostatnio regułę Matthiessen’a [3, 4], można wykorzystać wyniki pomiaru efektu Halla, przeprowadzone w możliwie szerokim zakresie temperatur. Dane te uzyskiwane są rutynowo dla stałych wartości pobudzenia elektrycznego próbki i indukcji pola magnetycznego (B). W tym przypadku pojawia się jednak trudność związana z niejednoznacznością interpretacją stałej Halla. Ruchliwości (μ_H) i koncentracje hallowskie elektronów i dziur (n_H, p_H) dają wtedy jedynie informację o przybliżonych wartościach, związanych z dominującą przewodnością, opisaną najczęściej modelem Drude’go:

$\sigma = q\mu_H n_H(p_H)$, gdzie $q > 0$ – ładunek elementarny. W takim podejściu, należy uwzględnić ryzyko złej interpretacji, pojawiające się gdy całkowita przewodność jest zdominowana przez powierzchnię lub obszary przyłączeniowe, a nie przez objętość badanego materiału [5]. Dodatkowo błędy interpretacyjne mogą pojawić się także dla wyników pomiarów, które przeprowadzono w niskich temperaturach dla cienkich warstw półprzewodnikowych, z uwagi na efekty kwantowe, wykraczające poza model Drude’go.

Właściwym sposobem na przezwycięzenie trudności interpretacyjnych jest założenie *a priori*, że transport nośników w materiale jest *wielokanałowy*. Już w latach ‘70 i ‘80 ubiegłego wieku pojawiały się prace interpretujące wyniki pomiarowe magnetotransportu (pomiar oporu i efektu Halla w funkcji zmieniającego się pola B), wskazujące na to, że nie da się wyjaśnić postaci składowych tensora przewodnictwa $\sigma_{xx}(B)$ i $\sigma_{xy}(B)$ inaczej, niż poprzez uwzględnienie dodatkowego kanału przewodności [6-8]. „Nadmiarowy” kanał był w materiałach typu- p z wąską przerwą energetyczną utożsamiany z przewodnictwem powierzchniowym, lub z transportem zachodzącym w paśmie dziur lekkich.

Powyższe obserwacje dały silny impuls rozwojowy dla technik określanych początkowo jako „metody dopasowania do wielu typów nośników” (ang. *multiple carrier fitting*) [9]. Znaczny postęp w charakteryzacji wielokanałowego transportu nośników ładunku nastąpił dzięki przełomowej pracy Beck’a i Anderson’a [10], oraz algorytmom opracowanym przez Dziubę i Górską [11]. Stworzyli oni podwaliny pod nową klasę metod obliczeniowych, nazywanych obecnie „analizą widm ruchliwości” (ang. *mobility spectra analysis – MSA*) [12].

W niniejszej pracy przedstawiamy aktualny stan rozwoju techniki MSA w Wojskowej Akademii Technicznej. Omówione zostały typowe ograniczenia związane z preparatyką próbek i możliwościami wynikającymi z dostępnych zakresów pomiarowych. Zaprezentowane zostały także przykładowe widma ruchliwości, otrzymane opracowanymi w WAT, autorskimi algorytmami. Postać tych widm dla omawianych materiałów o wąskiej przerwie energetycznej, wskazuje na potrzebę uwzględniania specyfiki wielokanałowego transportu nośników ładunku w fizycznym modelowaniu materiałów.

Obiekt badań

Obiektem badań testowych była warstwa związku potrójnego $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($x=0,19$) o grubości $5,2\text{-}\mu\text{m}$, domieszczowana berylem (Be), przy założonej koncentracji objętościowej $\sim 1 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$. Proces osadzania warstwy wykonany został na $2''$ podłożu z niedomieszczowanego intencjonalnie arsenku galu (GaAs) metodą epitaksji z wiązek molekularnych (ang. *molecular beam epitaxy* - MBE). Do tego celu zastosowany został reaktor RIBER Compact 21. Na etapie przygotowania, na powierzchni podłoża osadzono 250 nm grubości warstwę z tego samego pół-izolacyjnego GaAs, aby przykryć resztkowe zanieczyszczenia i precyzyjniej kontrolować kolejne etapy procesu [13]. Właściwy wzrost warstwy InAsSb wykonano z prędkością ok. $0,5\text{ [}\mu\text{m/h]}$.

Otrzymana struktura półprzewodnikowa została pocięta na mniejsze kawałki na których następnie zdefiniowano kształt docelowych próbek w procesie fotolitografii oraz naniesiono złote pola kontaktowe metodą elektrochemiczną. Wybrana została geometria 4-listnej kończyny, spełniająca założenia metody van der Pauwa [14]. Po etapie trawienia chemicznego warstwy do podłoża, dookoła obrysu zdefiniowanego wcześniej, próbka została wycięta mechanicznie w obrysie kwadratowym o polu powierzchni $5 \times 5\text{ mm}^2$. Montaż próbki do dedykowanej podstawki pomiarowej został wykonany techniką klejenia, natomiast złote połączenia elektryczne tzw. „bondingiem”.

Metoda eksperymentalna i badania teoretyczne

Pomiary magnetotransportu wykonano w systemie CFMS16T (ang. *Cryogen-Free Magnet System 16T*), firmy Cryogenic Ltd, wyposażonym w cewkę nadprzewodzącą o maksymalnej indukcji pola magnetycznego $\pm 16\text{ T}$. W tej konstrukcji, zarówno magnes jak i wbudowany kriostat nie wymagają do działania ciekłego helu. Pomiar odbywa się najczęściej w trybie bezpośredniego owiewu rozprężonym gazowym helem o stałym ciśnieniu. Temperatura monitorowana jest czujnikami typu CernoxTM, które wraz z grzałkami stabilizującymi, sterowane są za pomocą kontrolerów PID (ang. *proportional-integral-derivative*).



Rys.1. System do pomiaru efektu Halla z magnesem nadprzewodzącym, chłodzonym w systemie z zamkniętym obiegiem helu (ang. *cryo-free*) [15]

Akwizycja danych została przeprowadzona w trybie stałonapięciowym z wykorzystaniem źródła prądowego Keithley 2400 Source Meter, nanowoltomierza Keithley 2182A oraz dedykowanej do pomiaru efektu Halla karty sterującej, umożliwiającej zautomatyzowanie procesu przełączania pomiędzy konfiguracjami pomiarowymi. Kompletne serie napięć pomiarowych zostały przeliczone zależnościami van der Pauwa, na wartości rezystywności (ρ) i współczynników Halla (R_H) w funkcji indukcji pola magnetycznego B .

Posługując się tymi wartościami wyliczono składowe tensora $\sigma_{xx}^{eksp.}(B)$ oraz $\sigma_{xy}^{eksp.}(B)$ przy pomocy wzorów [16]:

$$(1) \quad \sigma_{xx}^{eksp.}(B) = \frac{1}{\rho \left[\left(\frac{R_H B}{\rho} \right)^2 + 1 \right]}$$

$$(2) \quad \sigma_{xy}^{eksp.}(B) = \frac{\frac{R_H B}{\rho}}{\rho \left[\left(\frac{R_H B}{\rho} \right)^2 + 1 \right]}$$

Składowe te, w modelu Becka-Andersona [10] opisane są za pomocą ciągłej funkcji $S(\mu)$, zwanej *widmem ruchliwości* (ang. *mobility spectrum*):

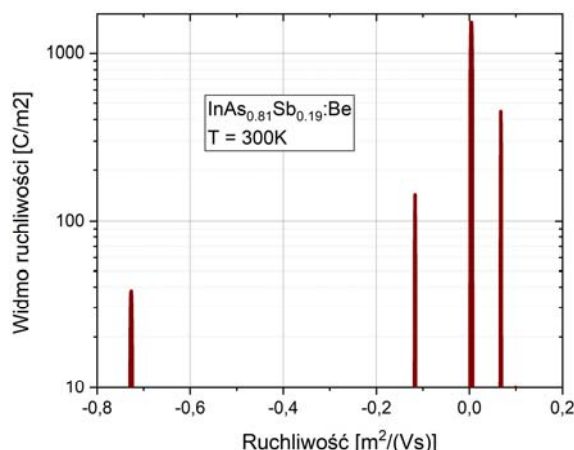
$$(3) \quad \sigma_{xx}^{obl.}(B) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{S(\mu)}{1 + \mu^2 B^2} d\mu,$$

$$(4) \quad \sigma_{xy}^{obl.}(B) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{S(\mu)\mu B}{1 + \mu^2 B^2} d\mu.$$

Zadaniem techniki MSA jest znalezienie widma ruchliwości $S(\mu)$, które najlepiej opisuje dane eksperymentalne (1)-(2) i dzięki temu dostarcza wiarygodnych informacji o *wszystkich* kanałach przewodnictwa odpowiedzialnych za transport ładunków w danej próbce. Zgodnie z przyjętą konwencją, ujemne wartości ruchliwości odpowiadają kanałom elektronowym.

Przykładowe wyniki

Znalezienie funkcji $S(\mu)$ jest trudnym zadaniem numerycznym, ale możliwym do rozwiązania w sposób przybliżony. W zależności od metody numerycznej, przekładającej się na stopień skomplikowania algorytmów, czasu i dokładności obliczeń, można wyróżnić takie techniki obliczeniowe jak: QMSA (ang. *quantitative mobility spectrum analysis*) [17], ME-MSA (ang. *maximum entropy – mobility spectrum analysis*) [18], bądź też wysokorozdzielcza analiza widm ruchliwości (ang. *high-resolution mobility spectrum analysis*) [16]. W niniejszej pracy rezultaty, uzyskano za pomocą oryginalnych algorytmów opracowanych w Wojskowej Akademii Technicznej. Wyniki dla temperatury 300 K przedstawiono na rysunku 2.



Rys.2. Widmo ruchliwości dla badanej warstwy $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($x=0,19$) domieszczowanej berylem, otrzymane dla temperatury 300 K .

W przedstawionym widmie widać wyraźnie cztery wąskie piki, z których dwa ujawniają obecność w próbce kanałów przewodnictwa typu dziurowego ($\mu > 0$) oraz dwa znacznie słabsze, które są związane z transportem typu elektronowego ($\mu < 0$). Jak wynika ze wzoru (3), pole pod

każdym z pików widma ruchliwości jest równe wkładowi danego kanału do całkowitego przewodnictwa (dla $B = 0$).

Zgodnie z oczekiwaniami dominuje pik związany z transportem dziur ciężkich o niskiej ruchliwości $\mu = +0,005 \text{ m}^2/(\text{Vs})$, ponieważ warstwa była intencjonalnie domieszkowana na typ-*p*. Przeprowadzona analiza MSA ujawniła jednak, że w transporcie biorą udział również dziury lekkie o większej ruchliwości, $\mu = +0,07 \text{ m}^2/(\text{Vs})$. Co więcej, wykryto obecność dwu wkładów typu elektronowego, $\mu = -0,73 \text{ m}^2/(\text{Vs})$ i $\mu = -0,13 \text{ m}^2/(\text{Vs})$, których pochodzenie jest przedmiotem dalszych analiz. Przypuszczalnie, niewielkie przewodnictwo, związane z elektronami o największej (ujemnej) ruchliwości świadczy o obecności warstwy inwersyjnej na powierzchni próbki.

Podsumowanie

Wojskowa Akademia Techniczna dysponuje obecnie kompletnym zapleczem technologicznym, pomiarowym i teoretycznym do wykonywania charakteryzacji wielokanałowego transportu nośników ładunku dla materiałów i struktur epitaksjalnych, głównie z rodziny związków $A^{\text{III}}-B^{\text{V}}$. Przykładowe dane zebrane dla materiałów o wąskiej przerwie energetycznej wskazują na to, że ilość kanałów przewodności, które powinno się uwzględniać w komercyjnych symulatorach, jest często większa niż ta, która wynika z uproszczonych modeli dla izotropowego związku dyspersyjnego.

Podziękowania

Praca finansowana w ramach programu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego pod nazwą „Regionalna Inicjatywa Doskonałości” w latach 2019 - 2022 nr projektu 014/RID/2018/19 kwota finansowania 4 589 200,00 zł

Autorzy: dr inż. Jarosław Wróbel, Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Fizyki Technicznej, ul. Gen. S. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa 46, E-mail: jaroslaw.wrobel@wat.edu.pl; dr inż. Jacek Boguski, Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Fizyki Technicznej, ul. Gen. S. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa 46, E-mail: jacek.boguski@wat.edu.pl; dr Sebastian Złotnik, Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Fizyki Technicznej, ul. Gen. S. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa 46, E-mail: sebastian.zlotnik@wat.edu.pl; dr hab. inż. Marek Kojdecki, Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Matematyki i Kryptologii, ul. Gen. S. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa 46, E-mail: marek.kojdecki@wat.edu.pl; prof. dr hab. inż. Jerzy Wróbel, Wojskowa Akademia Techniczna, Instytut Fizyki Technicznej, ul. Gen. S. Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa 46, oraz Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk, Al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa E-mail: jerzy.wrobel@wat.edu.pl;

LITERATURA

- [1] S. Samira, H. Md Sakib, H. Omiya, P. Partha Sarathi, H. Md Razuan, K.I. Syed, Semiconductor Device Modeling and Simulation for Electronic Circuit Design, (2020).
- [2] Ansys_Lumerical, Semiconductor Material Model Properties, in, <https://support.lumerical.com/hc/en-us/articles/360034919113-Semiconductor-Material-Model-Properties>, 2021.
- [3] Y.D. Sun, Y.G. Zhou, J. Han, W. Liu, C.W. Nan, Y.H. Lin, M. Hu, B. Xu, Strong phonon localization in PbTe with dislocations and large deviation to Matthiessen's rule, Npj Comput Mater, 5 (2019).
- [4] M. Znidaric, Modified Matthiessen's rule: More scattering leads to less resistance, Phys Rev B, 105 (2022).
- [5] L.Ö. Olsson, C.B.M. Andersson, M.C. Håkansson, J. Kanski, L. Ilver, U.O. Karlsson, Charge Accumulation at InAs Surfaces, Phys Rev Lett, 76 (1996) 3626-3629.
- [6] H.H. Wieder, Transport coefficients of InAs epilayers, Appl Phys Lett, 25 (1974) 206-208.
- [7] E. Finkman, Y. Nemirovsky, Two-electron conduction in n-type $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, Journal of Applied Physics, 53 (1981).
- [8] M.C. Gold, D.A. Nelson, Variable magnetic field Hall effect measurements and analyses of high purity, Hg vacancy (p-type) HgCdTe , Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 4 (1986) 2040-2046.
- [9] J.S. Kim, D.G. Seiler, W.F. Tseng, Multicarrier characterization method for extracting mobilities and carrier densities of semiconductors from variable magnetic field measurements, Journal of Applied Physics, 73 (1993) 8324-8335.
- [10] W.A. Beck, J.R. Anderson, Determination of electrical transport properties using a novel magnetic field-dependent Hall technique, Journal of Applied Physics, 62 (1987) 541-554.
- [11] Z. Dziuba, M. Gorska, Analysis of the Electrical-Conduction Using an Iterative Method, J Phys Ii, 2 (1992) 99-110.
- [12] J. Antoszewski, L. Faraone, Mobility spectrum analysis of magnetic field dependent Hall data in HgCdTe epitaxial films, P Soc Photo-Opt Ins, 2552 (1995) 146-157.
- [13] D. Benyahia, Ł. Kubiszyn, K. Michalczewski, A. Kęłowski, P. Martyniuk, J. Piotrowski, A. Rogalski, Molecular beam epitaxial growth and characterization of InAs layers on GaAs (001) substrate, Opt Quant Electron, 48 (2016) 428.
- [14] L.J. van der Pauw, A Method of Measuring Specific Resistivity and Hall Effect of Discs of Arbitrary Shape, Philips Research Reports, 13 (1958) 1-9.
- [15] Cryogenic_Ltd, Cryogen-Free Magnet System User Manual, in, London, 2014.
- [16] J. Antoszewski, G.A. Umana-Membreno, L. Faraone, High-Resolution Mobility Spectrum Analysis of Multicarrier Transport in Advanced Infrared Materials, Journal of Electronic Materials, 41 (2012) 2816-2823.
- [17] J. Antoszewski, L. Faraone, Quantitative mobility spectrum analysis (QMSA) in multi-layer semiconductor structures, Opto-Electron Rev, 12 (2004) 347-352.
- [18] S. Kiatgamolchai, M. Myronov, O.A. Mironov, V.G. Kantser, E.H.C. Parker, T.E. Whall, Mobility spectrum computational analysis using a maximum entropy approach, Phys Rev E, 66 (2002).