

II-VI 族半导体特性参数的三维边缘元分析¹

徐善驾 盛新庆 贾冬焱

(中国科技大学电子工程与信息科学系 合肥 230027)

摘 要 本文用三维边缘元方法分析了电导率为张量的有间隙 II-VI 族半导体材料的散射特性; 给出了散射参数与半导体特性参数之间的关系曲线并说明了用这些曲线确定 II-VI 族半导体电特性参数的方法。该方法直接从泛函变分出发, 避开了其它方法中求解有损超薄各向异性介质填充波导本征值问题的困难, 简化了求解过程。计算结果与实验值的比较证实了本方法具有有效、可靠和精确的特点。

关键词 II-VI 族半导体, 特性参数, 三维边缘元方法

中图分类号 TN304.25, TN015

1 引 言

由于 II-VI 族半导体在工艺上很难实现良好的欧姆接触, 所以严重阻碍了人们对该类半导体的特性参数, 诸如电导率、迁移率和载流子浓度等的测量和确定^[1]。为克服这一困难, 文献 [1] 提出了一种无接触微波测量方法, 这种方法的基本思想是将半导体特性参数的确定归结为对半导体样品散射特性的测量。实现这个思想的关键是要在理论上确定半导体外延层特性参数与样品散射参数之间的关系, 这是一个复杂的波导不连续性问题。在过去的实验中, 为了方便分析, 通常选择样品与矩形波导窄边等高^[1-4]; 但是, 要使样品与波导窄边完全等高在实现上是非常困难的, 在工艺上和实际应用中更需要考虑的是不等高, 即有间隙存在的情况, 为此需要分析有间隙 II-VI 族半导体材料的散射特性。

为了确定 II-VI 族半导体材料的特性参数, 如迁移率和载流子浓度, 需要研究有效介电常数为张量的 II-VI 族半导体的散射特性, 即研究外磁场作用下样品的散射特性。这时介质电导率和介电常数成为复张量, 而且是有损非互易的。对于这种介电常数为复张量的有耗非互易超薄介质结构的边值问题, 因为尚未找到其本征模之间简单的正交关系, 因此很难用模匹配的方法来分析。

本文直接从全磁场矢量泛函出发, 将三维边缘元推广应用于这种有耗非互易介质三维不连续性问题, 既绕过了求解复超越方程的困难, 又从根本上避开了求解波导本征值和本征函数问题, 从而大大简化求解过程, 提高了计算精度和解题效率。

2 分析方法

图 1 是本文所研究的间隙 II-VI 族半导体样品部分填充矩形波导的不连续性结构示意图。样品包括外延层和基片, 其中外延层的介电常数是复张量 $[\epsilon_p]$, 基片的介电常数 ϵ_s 是复常数。在研究中为了克服样品与波导底面直接接触给实验带来的不稳定性, 我们在样品与波导底面之间放置一块介质块作衬底, 这样可以大大提高测量的稳定性和精度。该结构的横截面如图 2 所示。

¹ 1997-07-11 收到, 1998-02-12 定稿

国家自然科学基金会 (NSFC), 国家教委基金和德国研究联合会 (DFG) 联合资助项目

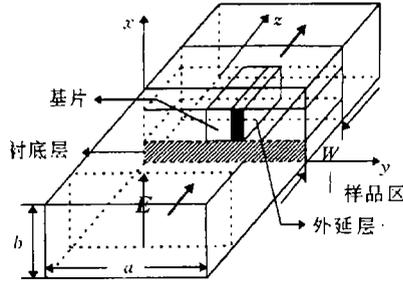


图 1 间隙 II-VI 族半导体样品部分填充矩形波导结构示意图

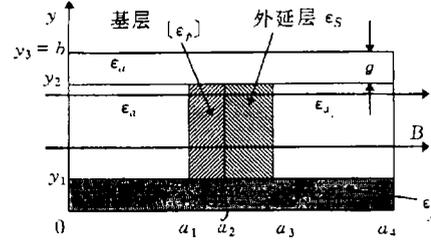


图 2 矩形波导中层状 II-VI 族半导体介质块横截面图

图 1、2 中所示不连续性问题可以归结为下列全磁场矢量泛函的变分问题^[4]：

$$F(\mathbf{H}^a, \mathbf{H}) = \int \int \int_{\Omega} (\nabla \times \mathbf{H}^a) \cdot ([\epsilon_r]^{-1} \nabla \times \mathbf{H}) d\Omega - k_0^2 \int \int \int_{\Omega} \mathbf{H}^a \cdot [\mu_r] \cdot \mathbf{H} d\Omega + j\omega\epsilon_0 \int \int_{\Gamma} \mathbf{H}^a \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{E}) d\Gamma, \quad (1)$$

这里

$$[\epsilon_r] = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad [\mu_r] = \begin{bmatrix} \mu_{xx} & \mu_{xy} & \mu_{xz} \\ \mu_{yx} & \mu_{yy} & \mu_{yz} \\ \mu_{zx} & \mu_{zy} & \mu_{zz} \end{bmatrix} \quad (2)$$

其中 \mathbf{H} 是求解场, \mathbf{H}^a 是伴随场, $[\epsilon_r]$ 和 $[\mu_r]$ 分别是电介质张量和磁介质张量。

为了消除伪解, 我们采用图 3 所示的 12 参量六面体边缘元来求解上述问题。此构造的特点是用长方体中平行于 ξ 轴的四条边中点的切向分量 $H_{\xi 1}$, $H_{\xi 2}$, $H_{\xi 3}$, $H_{\xi 4}$ 来插值 H_{ξ} ; 平行于 ζ 轴的四条边中点的切向分量 $H_{\zeta 1}$, $H_{\zeta 2}$, $H_{\zeta 3}$, $H_{\zeta 4}$ 来插值 H_{ζ} ; 平行于 η 轴的四条边中点的切向分量 $H_{\eta 1}$, $H_{\eta 2}$, $H_{\eta 3}$, $H_{\eta 4}$ 来插值 H_{η} 。由于这样构造的有限元空间不仅在旋度空间中是协调的, 而且能正确模拟旋度算子的 0 空间, 因而能消除伪解。具体计算公式可参阅文献 [5], 这里恕不列出。在计算程序中我们利用自动剖分技术增加程序的通用性和方便性, 采用稀疏矩阵压缩技术以节省内存和提高计算效率。

3 数值分析

为了证实本文程序对分析 II-VI 族半导体特性参数的有效性和可靠性, 我们首先计算无外加磁场情况下的简单例子。图 4 是有间隙 II-VI 族半导体填充矩形波导传输系数随间隙高度变化的曲线。样品的特性参数为 $\epsilon_p = (-2861, -103052)$, $\epsilon_s = (11, -0.5)$, $d_p = 0.0047\text{mm}$, $d_s = 1.0\text{mm}$ 。衬底介质块介电常数为 2.33, 厚为 0.2mm, 波导尺寸 ($a = 22.86\text{mm}$, $b = 10.16\text{mm}$)。由图 4 可见它们吻合得较好。证实了本文程序的可靠性和精确性。

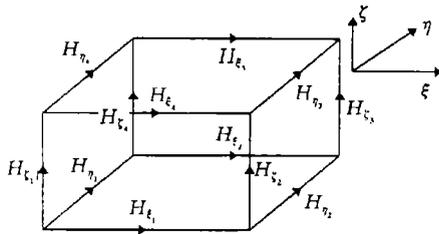


图3 12参量六面体边缘元单元

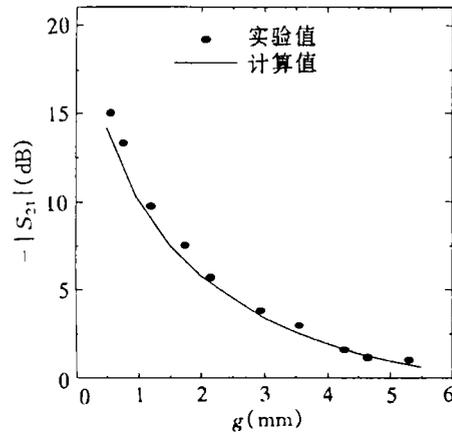


图4 传输系数随间隙高度变化曲线

为了测得 II-VI 族半导体的电特性参数 (包括电导率、迁移率、载流子浓度等), 需要研究样品在外磁场作用下的散射特性。当 II-VI 族半导体样品放在如图 2 所示的磁场中时, 根据半导体理论, 在磁场中的半导体由于霍尔效应, 其外延层电导率变成张量形式^[1]:

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ 0 & -\sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

其中

$$\sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_0(1 - j\omega\tau)/[1 + (\mu_e B)^2], \quad (3a)$$

$$\sigma_{yz} = \sigma_{yy}\mu_e B, \quad (3b)$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 = en_e\mu_e. \quad (3c)$$

这里 $\tau = 5 \times 10^{-13} \text{ s}$, μ_e 是外延层的迁移率, n_e 是载流子浓度, B 是磁场强度, e 是电子电量。磁场作用下 II-VI 族半导体介电常数张量可根据下面关系确定。

$$[\epsilon] = \epsilon_{st}[I] - \frac{j}{\omega\epsilon_0}[\sigma] \quad (4)$$

这里 $[I]$ 是单位矩阵, 静介电常数 ϵ_{st} 通常取为 20。

图 5 是不同间隙时磁场强度对散射特性的影响。图 6、图 7 和图 8 给出了在不同间隙高度情况下传输系数随 II-VI 族半导体迁移率的变化曲线, 所有计算是在与图 4 几何尺寸相同条件下进行的。由这些曲线我们可以看出下面几点: (1) 在我们关心的迁移率变化范围内 ($5 \sim 30 \times 10^3 \text{ cm}^2/\text{VS}$), 传输系数随 II-VI 族半导体迁移率变化曲线是单调的; (2) 在外加磁场较小时, 传输系数随 II-VI 族半导体迁移率变化几乎是线性的, 随着外加磁场加强逐渐变成非线性; (3) σ_{xx} 越大, 传输系数随 II-VI 族半导体迁移率变化越平坦。

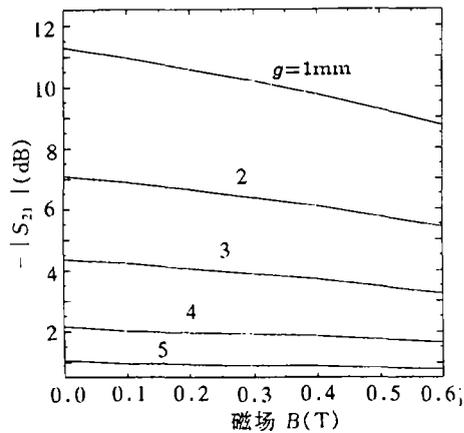
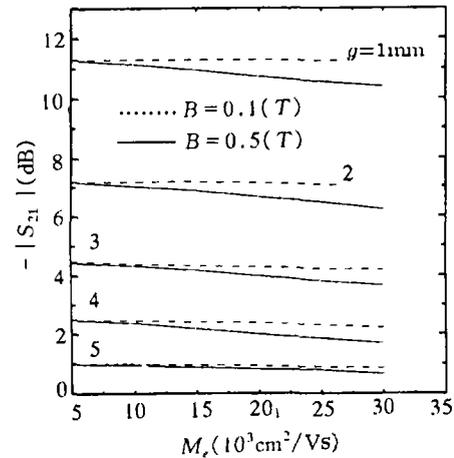
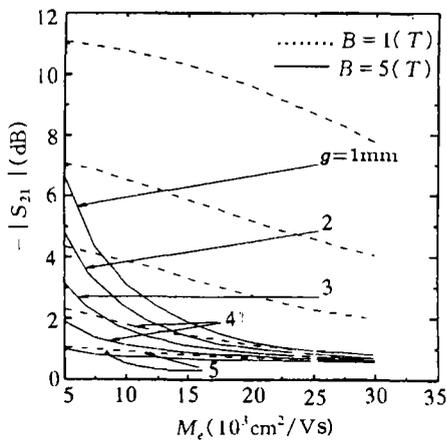
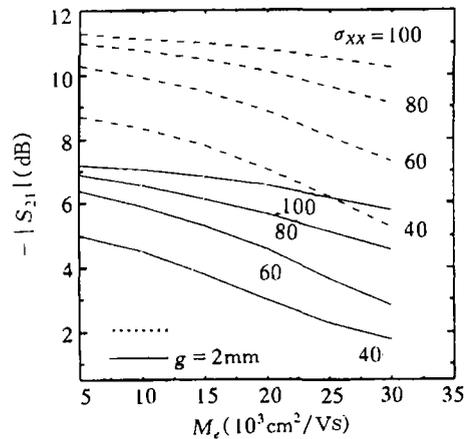


图 5 不同间隙情况下传输系数随磁场变化曲线

图 6 不同间隙高度下传输系数随 II-VI 族半导体迁移率变化曲线 ($\sigma_{xx} = 100$)图 7 不同间隙高度下传输系数随 II-VI 族半导体迁移率变化曲线 ($\sigma_{xx} = 100$)图 8 不同间隙高度下传输系数随 II-VI 族半导体迁移率变化曲线 ($B = 0.5T$)

根据上述传输系数随 II-VI 族半导体迁移率变化的曲线, 便可以确定 II-VI 族半导体特性参数。具体步骤如下: 首先在无磁场作用下测出 II-VI 族半导体的散射参数, 并根据文献 [3] 的方法定出参数 σ_{xx} ; 然后在外加磁场的情况下测出 II-VI 族半导体的散射参数, 再根据本文给出的各种散射参数随迁移率变化的曲线, 确定样品的迁移率 μ_e ; 最后, 根据关系 (3c) 式确定出样品的载流子浓度 n_e 。表 1 给出了不同间隙下同一半导体材料的特性参数。从表 1 可以看出, 虽然间隙不同, 测得的传输系数也不相同, 但最后确定的半导体的迁移率和载流子浓度却是几乎相同的, 证明了本文方法的有效性。

表 1 不同间隙下所确定的同一半导体材料的特性参数 $\sigma_{xx} = 100(\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$ $B = 5(T)$

| $g(\text{mm})$ | 1.0 | 2.0 | 3.0 |
|-------------------------------------|------|------|------|
| $- S_{21} (\text{dB})$ | 3.11 | 2.38 | 1.46 |
| $\mu_e(10^3 \text{cm}^2/\text{Vs})$ | 9.95 | 9.93 | 9.98 |
| $n_e(10^{16} \text{cm}^{-3})$ | 6.28 | 6.29 | 6.26 |

参 考 文 献

- [1] Greiner P, Poligone L, Becker C R, Geick R. Contactless measurement of the conductivity of II-VI epitaxial layers by means of the partially filled waveguide method, *Appl. Phys.*, 1992, A55: 279-288.
- [2] Shanjia Xu, Xinzhang Wu, Greiner P, Becker C R, Geick R, Microwave transmission and reflection of stratified lossy dielectric segment partial filled waveguide, *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 1992, 13(4): 569-587.
- [3] Shanjia Xu, Xingqing Sheng, Greiner P, Becker C R, Geick R, High-order finite-element analysis for scattering characteristics of II-VI semiconductor materials, *Chinese Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 1992, 12(6): 177-184.
- [4] Shanjia Xu, Xingzhang Wu, Boege P, Schafer H, Becker C R, Geick R, Scattering characteristics of 3-D discontinuity consisting of semi-conductor sample filled in waveguide, *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 1993, 14(10): 2155-2190.
- [5] Chen C H, Lien C D. The variational principle for non-self-adjoint electromagnetic problems, *IEEE Trans. on Microwave Theory and Tech.*, 1993, MTT-28(8): 878-886.

3-D EDGE-ELEMENT ANALYSIS FOR THE CHARACTERISTIC
PARAMETERS OF II-VI SEMICONDUCTOR MATERIALS

Xu Shanjia Sheng Xinqing Jia Dongyan

*(Dept. of Electron. Eng. and Infm. Sci.,**University of Science and Technology of China, Hefei 230027)*

Abstract The scattering characteristics of II-VI semiconductor materials with tensor conductivity resulting of the Hall-effect, filled in waveguide with gaps are analyzed with 3-D edge-element. Some useful curves are given and the procedure of determining mobility and carrier concentration of II-VI semiconductor materials with these curves is described. Since this method starts from the functional variation directly, it avoids the difficulty, met in the other methods, of solving the eigenvalue problem for very thin lossy isotropic dielectric loaded waveguide. The experimental results confirm the effectiveness, reliability and accuracy of the approach.

Key words II-VI semiconductor, Characteristic parameters, 3-D edge-element

徐善驾: 男, 1939年生, 教授, 博士生导师, 长期从事微波与毫米波的研究和教学工作。
盛新庆: 男, 1968年生, 博士, 研究方向是电磁场数值方法。
贾冬焱: 男, 1972年生, 硕士研究生, 研究方向是电磁场数值方法。