

硅反型层中的 Anderson 转变*

孔光临 廖显伯 杨喜荣 张殿琳 林淑媛
(中国科学院半导体研究所) (中国科学院物理研究所)

提 要

在 4.2—20K 温度范围内,利用 MOS 器件的沟道电导率随栅压的变化,研究了 Si-SiO₂ 界面反型层中的 Anderson 转变.发现实验 $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线外推到 $\frac{1}{T} = 0$ 时,一般都不交于一点.考虑到界面势场除具有微观无序性外,尚具有宏观不均匀性,而把反型层看成是由许多迁移率边互不相同的宏观小区域组合而成的非均匀系统;在每个小区域内,再采用均匀无序系统的定域化模型来处理.这样,计算的结果与实验符合,也有助于解释迁移率边随费米能级变化,出现磁阻振荡等反常效应.

一、引 言

在无序系统的理论中,定域化问题是近几年来注重研究的一个基本课题.

依照 Anderson^[1] 的定域化理论,无序系统可以当做有序系统受到扰动来处理.当晶格周期场受到扰动时,能带将会展宽;当无序势场超过一定限度以后,原先公有化的能带就会发生定域化. Mott^[2] 假定,这种定域化首先在能带尾部发生,并且,有一明确的分界能量 E_c (常称迁移率边) 把定域态与扩展态分开. 这样,当费米能级 E_F 从定域态越过 E_c 而进入扩展态时,系统的电导机制将发生从热激活电导到金属性电导的转变,即所谓 Anderson 转变. 倘若 E_F 是从扩展态逼近 E_c 的,那么,在绝对零度下,系统的电导率 σ 将趋于一个极小值,即最小金属电导率 σ_{\min} .

在 MOS 器件的 Si-SiO₂ 界面的反型层中,由于靠近界面的氧化层电荷及界面态电荷的无序势场,二维表面子带的带尾也可能发生定域化. 当改变栅压使载流子在二维子带中的填充位置(即 $T = 0$ 时 E_F 的位置)越过 E_c 时,沟道电导将发生 Anderson 转变.

在 $E_F = E_c$ 的情况下, Mott 和 Pepper^[3] 曾经指出,对于均匀二维无序系统(配位数 $z = 4$),最小金属电导率

$$\sigma_{\min} \simeq 0.1e^2/h \simeq 3 \times 10^{-5} \Omega^{-1}, \quad (1)$$

是一个不依赖于无序性质的普通常数.

在 $E_F < E_c$ 时,电导机制是热激活的,电流主要由热激活到迁移率边之上的载流子输运

$$\sigma = \sigma_{\min} \exp - (\Delta E/KT), \quad (2)$$

* 1979年11月5日收到.

式中 $\Delta E = E_c - E_f$. 此外, 载流子还可以在定域态之间跳跃; 或者跳跃到最近邻状态, 或者跳跃到较远的, 但所需激活能较小的状态. 前者叫做最近邻跳跃, $\sigma \propto \sigma_0 \exp - (\Delta E_1/KT)$; 后者叫做变程跳跃, $\sigma \propto \exp - [\Delta E_2/(KT)^3]$. 由于 $\sigma_{\min} \gg \sigma_0$, 一般观察不到最近邻跳跃, 只有在很低的温度下, 才能观察到变程跳跃的 $T^{-1/3}$ 规律. 因此, 在一定的低温范围内, 热激活电导率应由式 (2) 描写, $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 应为直线关系, 并且不同栅压 V_g (即不同 ΔE) 的一组直线应相交于一点, 即有同一截距 $\ln \sigma_{\min}$.

在实验上已有不少人在 Si 反型层中观察到 Anderson 转变现象, 有些实验结果^[4]与 Mott 关于二维系统定域化的理论很好符合, 但也有不少实验结果有明显的差异^[5, 6], 主要表现在: 实验的最小金属电导值比理论预期的大; 迁移率边随电子浓度 (或费米能级) 而变化; 从电导测量推断电子处于定域态能量状态时观察到磁阻振荡效应^[6]. 因此, 发生 Anderson 转变的机制以及转变点附近的输运性质, 至今仍是有争论的问题.

我们也利用 Si 反型层在液氮温度附近进行了实验, 测得的 $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线的截距一般都不会聚于一点. 我们发现, 如果考虑到反型层中可能存在宏观不均匀性, 而把反型层看成是由很多迁移率边互不相同的宏观小区域组合而成, 对每个小区域再采用均匀无序系的定域化模型来处理. 这样计算的结果与我们的实验数据符合得很好. 用这样的方法也可以定性地解释上述几点矛盾.

二、实验结果

实验所用 MOS 器件是由北京半导体器件六厂和天津半导体器件四厂提供的. 这些器件都是做在 Si(100) 面上的, 栅氧化层厚度为 1200—200 Å. 沟道的宽长比为 100—600. 用 C-V 法测得净界面电荷密度约为 1×10^{11} — $1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$.

实验是在 4.2K 到 20K 温度下进行的, 通过改变栅压的办法来改变费米能级与迁移率边的相对位置. 测量中, 固定漏源电流 I_D 或固定漏源电压 V_D 所得之 $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线无明显差别. 下面的实验结果是在 $I_D = 10 \mu\text{A}$ 的条件下测出的.

图 1 和图 2 是两个典型的实验结果, 分别示出一个 N 沟器件和一个 P 沟器件在不同栅压下的 $\ln \sigma$ 随 $\frac{1}{T}$ 的变化关系. 图中的点是实验值. 实验结果清楚地显示出, 在一定的温度范围, $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 接近于直线关系. 并且, 随着栅压的增加, 激活能从 $\sim 1.5 \text{meV}$ 渐次降为零 (在实验误差范围内), 即反型层沟道电导发生了热激活电导 (斜线) 向金属性电导 (平线) 的转变. 但是, 我们注意到图 1、图 2 的实验 $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线外推到 $\frac{1}{T} \approx 0$ 时并不交于一点, 与式 (2) 预期的不一致. 这是我们实验结果的一个明显特点, 对不同样品所测得的结果一般都是如此.

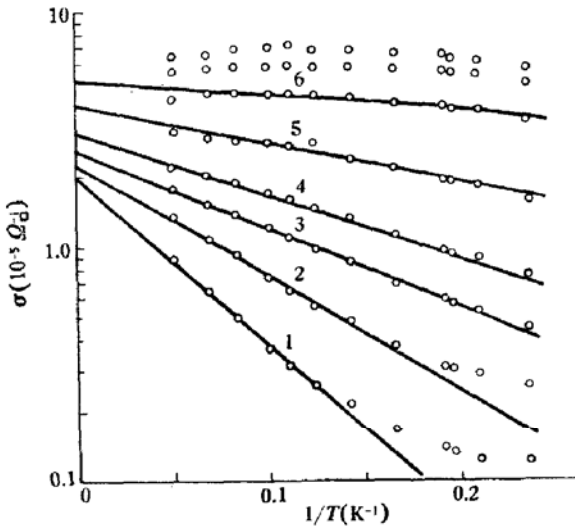


图1 不同栅压下, N 沟道器件 (4D01) 沟道电导率与温度的关系

- 1— $V_g=1.5V, \Delta E=1.42meV, X=0.08, K=0.4;$
- 2— $V_g=2.0V, \Delta E=1.01meV, X=0.12, K=2.2;$
- 3— $V_g=2.5V, \Delta E=0.72meV, X=0.18, K=3.5;$
- 4— $V_g=3.0V, \Delta E=0.53meV, X=0.27, K=5.0;$
- 5— $V_g=4.0V, \Delta E=0.42meV, X=0.35, K=7.8;$
- 6— $V_g=6.0V, \Delta E=0.19meV, X=0.41, K=10.8.$

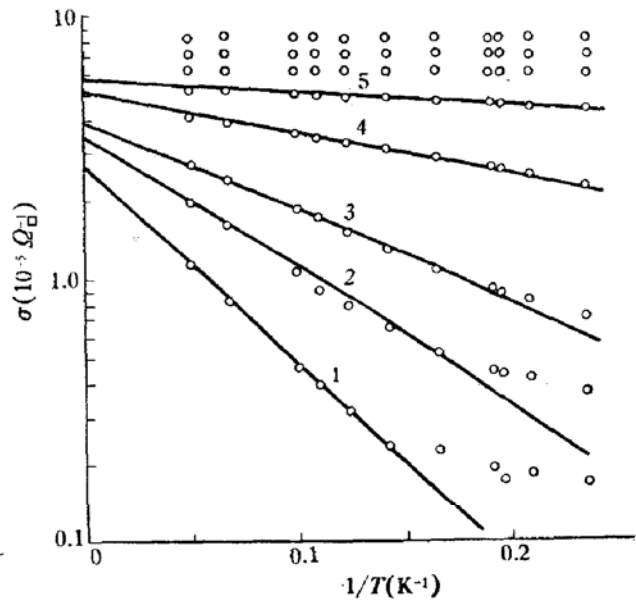


图2 不同栅压下, P 沟道 MOS 器件 (3C01) 沟道电导率与温度的关系

- 1— $V_g=-6V, \Delta E=1.52meV, X=0.05, K=1.6;$
- 2— $V_g=-7V, \Delta E=1.12meV, X=0.22, K=2.8;$
- 3— $V_g=-8V, \Delta E=0.82meV, X=0.29, K=3.6;$
- 4— $V_g=-10V, \Delta E=0.42meV, X=0.36, K=5.8;$
- 5— $V_g=-12V, \Delta E=0.15meV, X=0.39, K=7.2.$

三、存在不均匀性时反型层中的二维电导

为解释上面的实验结果,需要考虑不均匀性对反型层中二维电导的影响. Cohen^[7] 曾讨论过无序系统运输的非均匀方式, Pepper^[8] 也讨论过长程势起伏对反型层中二维电导及最小金属电导率的影响.

从 Si-MOS 器件的工艺条件来看, Si-SiO₂ 界面的粗糙度可达几百埃甚或上千埃的数量级. 这可能会导致宏观缺陷、界面电荷或界面附近氧化层电荷的聚集等,从而使界面上或界面附近电荷的分布不均匀,最终在反型层中造成既有微观无序性、又有宏观非均匀性的势场. 在这样的情况下,反型层就不再是理想均匀的无序系统,更应该把它看成是一种非均匀无序系统. 我们假定,可以把反型层看成是由很多迁移率边互不相同的宏观小区域组合而成,它们遵从不均匀系的经典统计理论;小区域应该足够小,以致在每个小区域内部都可以认为是理想均匀的无序系统,而可以采用前述的 Mott 定域化模型.

这样,当栅压逐渐增加时,反型层中有些小区域先呈现金属性行为,有些小区域晚些呈现金属性行为. 因而,在反型层中同时存在着两种区域. 一种是金属性导电区域,在这些区域中费米能级在迁移率边之上,已有一部分电子填充于扩展态中,电流主要由这些扩展态中的电子输运. 随着栅压的增加,费米能级相对于迁移率边逐渐上升,参加导电的扩展态电子数将增加,因而金属性区的电导值也将逐渐增加. 假定可以把金属区的电导表示成如下形式:

$$\sigma = \sigma_{\min}(1 + k). \quad (3)$$

式中 k 应是费米能级与迁移率边距离的函数。另一种是热激活电导区域。在这些区域中, 费米能级在迁移率边以下, 电子大部分处于定域态中, 其电导主要是激发到迁移率边的电导, 可以用式 (2) 描写, 即表示成

$$\sigma_2 = \sigma_{\min} \exp(-\Delta E/kT). \quad (4)$$

应该说, 对每一个小区域都有各不相同的 ΔE 值或 k 值, 因为它们的迁移率边位置各不相同。以下为计算简便, 我们对热激活电导区取一个统一的 ΔE 值; 对金属电导区取一个统一的 k 值。这样, ΔE 和 k 值都具有统计平均的意义。

我们假定, 这两种区域是完全无规则分布的, 对这两种区域采用两相混合物的电导统计公式(二维形式)^[9, 10]

$$\sigma = \frac{1}{2} [(2x - 1)(\sigma_1 - \sigma_2) + \sqrt{(2x - 1)^2(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4\sigma_1\sigma_2}], \quad (5)$$

式中 x 表示金属性电导区所占的分数, 它只由栅压决定。将 σ_1, σ_2 的式子代入上式得:

$$\sigma = \frac{\sigma_{\min}}{2} [(2x - 1)(1 + k - e^{-\frac{\Delta E}{kT}}) + \sqrt{(2x - 1)^2(1 + k - e^{-\frac{\Delta E}{kT}})^2 + 4(1 + k)e^{-\frac{\Delta E}{kT}}}], \quad (6)$$

由此可以看到:

1) 当 $\frac{1}{T} \rightarrow 0$ 时,

$$\sigma = \frac{\sigma_{\min}}{2} [(2x - 1)k + \sqrt{(2x - 1)^2k^2 + 4(1 + k)}]. \quad (7)$$

这也就是 $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线与纵轴的交点, 它一般并不等于最小金属电导率值 σ_{\min} , 而且与 x 有关。对于不同栅压 (x 不同) $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线并不交纵轴于同一点。

2) 当所有区域都转变成金属性电导时, 即 $x = 1, \Delta E \rightarrow 0$ 时,

$$\sigma = \sigma_{\min}(1 + k) > \sigma_{\min}.$$

因而实验上由第一条平线所确定的电导值总是大于最小金属电导率的理论值。

考虑了反型层中可能存在宏观不均匀性以后, 至少在定性上可以解释有些实验结果的 $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线不交于一点以及实验测出的最小金属电导值大于理论值。

四、实验结果的分析 and 讨论

图 1 和图 2 中的实线, 是以 x, k 为参数(由两个实验点确定), 按 (6) 式计算的结果。对于 N 沟器件 (图 1), 栅压 V_g 从 1.5V 增至 6V, 相应的 x 值从 0.08 变到 0.41; k 值从 0.4 变到 10.8。对于 P 沟器件 (图 2), 栅压 V_g 从 6V 增至 12V, 相应的 x 值从 0.05 变到 0.39; k 值从 1.6 变到 7.2。这样一些 x 值和 k 值, 都是随着栅压的增加而增加的, 在物理上是合理的。

同时,我们看到,计算的曲线与实验点也是符合的(低温端实验点偏离,可能是由于 $T^{-1/3}$ 规律开始起作用,或者由于统计平均的激活能 ΔE 随温度降低而减少,这在计算时没有考虑)。由此得到的最小金属电导率为:对于N沟器件, $\sigma_{\min} \approx 2.0 \times 10^{-5} \Omega^{-1}$; 对于P沟器件, $\sigma_{\min} \approx 2.6 \times 10^{-5} \Omega^{-1}$; 它们与 Mott 预期的理论值一致。

不过,这里的 σ_{\min} 只是一个计算参数。前面已讲过,对于非均匀系统而言,由实验测量的第一条平线所确定的电导率往往大于 σ_{\min} 的理论值。而且,如果在极低温下测量,在 $T \rightarrow 0$ 时系统的剩余电导率有时还可能比 σ_{\min} 的理论值小。实际上,由式(6)可以看出, $x = 0.5$ 这一点是一个临界点。在绝对零度下,当 $x \leq 0.5$ 时, $\sigma = 0$; 而当 $x > 0.5$ 时, $\sigma = \sigma_{\min}(1+k)(2x-1)$ 。也就是说,只要金属区所占的分数在 0.5 以上,在 $T \rightarrow 0$ 时系统就有不为零的电导率,而且可以比最小金属电导率的理论值小(取决于 x 值)。

当然,对于一个具体的 Si-SiO₂ 界面反型层而言,在 Anderson 转变过程中究竟表现出什么样的行为,与界面的具体情况有关。对于比较均匀的反型层,就会出现大体上同时转变的可能性, $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$ 曲线就会交于一点。这相当于式(6)中从 $x = 0$ 跃变到 $x = 1$ (而 $k \rightarrow 0$) 的情况。

此外,我们讨论一下激活能问题。从图 1 和图 2 中可以看到,当栅压变化时,使式(6)与实验点吻合算出的激活能从 0.15 到 1.5 meV 变化。如果表面电子浓度,根据 $n_s = C_0(V_g - V_T)/e$ (其中 C_0 为氧化层电容, V_T 为电导阈值电压),由实验确定,那么由临界电子浓度(即当 $\Delta E \approx 0$ 时之电子浓度)及二维子带状态密度可以大致估计迁移率边的位置。如果认为^[6]此时状态密度与未受扰动二维子带的状态密度没有显著差别,则状态密度 $D \approx 1.7 \times 10^{11}/\text{cm}^2 \cdot \text{meV}$ 。由实验数据算出的临界电子浓度约为 $9 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ 。由此确定迁移率边应在未扰动带边之上 $\sim 5 \text{meV}$ 。而我们得到的最大激活能才只有 1.5 meV,这似乎是个矛盾。Pepper^[3] 认为,这可能是由于随着定域态被电子填充,无序程度增大,因而使迁移率边随电子浓度的增加而向上移动。Tsui 等^[6]曾因此认为,在此温度范围,是近邻跳跃电导。诚然,当 E_F 距迁移率边较远时,跳跃电导的参加是使激活能减小的一个因素。此外,非均匀性的存在也是原因之一。在第三节中计算二维电导时,对激活电导区,曾采用了一个统一的统计平均激活能。实际上,由于各个小区域的迁移率边高低不同,它们的激活能各不相同,它们在激活电导中的作用有很大差别。对激活电导起主要作用的,只是那些迁移率边离 E_F 比较近的小区域。因此,虽然迁移率边的最可几位置在 E_c ,但从电导的角度得到的统计平均激活能 ΔE 却远小于 $E_c - E_F$,这是很易理解的。

从两相共存的角度出发也可以理解出现磁阻振荡的可能性。因为虽然从总的电导率来看,电子处于定域态之中,但总有些小区域的迁移率边比较低,而有一定数量的电子处于扩展态之中。

向提供 MOS 器件样品及计算条件的北京半导体器件六厂、天津半导体器件四厂、半导体所四室和理化中心表示衷心感谢。

参 考 文 献

- [1] Anderson P. W., *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
 [2] Mott N. F., *Phil. Mag.* **13**, 689 (1966).

- [3] Mott N. F. et al., *Proc. R. Soc. Lond. A.* **345**, 169 (1975).
- [4] Pepper M. et al., *CRC Critical Reviews in Solid State Sciences*, 375 (1975).
- [5] Arnold E., *Appl. Phys. Lett.* **25**, 705 (1974).
- [6] Tsui D. C. and Allen S. J. *Phys. Rev. Lett.*, **32**, 1210 (1974).
- [7] Cohen M. H., *Phys. Rev. Lett.* **30**, 699 (1973).
- [8] Pepper M., *Proc. R. Soc. Lond. A* **353**, 225 (1977).
- [9] Оделевский В. И., *ЖТФ* **21**, 678 (1951).
- [10] Kirkpatrick S., *Phys. Rev. Lett.* **27**, 1722 (1971).

ANDERSON TRANSITION IN SILICON INVERSION LAYERS

Kong Guang-lin, Liao Xiat-bo, Yang Xi-rong
(*Institute of Semiconductors, Academia Sinica*)

Zhang Dian-lin, Lin Shu-yuan
(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

Abstract

An investigation of the Anderson Transition in MOS inversion layers is given by measuring the dependence of the channel conductivity on gate voltages in the temperature range from 4.2K to 20K. It is found through the experiment that the plots $\ln \sigma \sim 1/T$ do not generally converge as extrapolated to $1/T = 0$. In view of the fact that interface potential fields have not only the microscopic disorders, but also the macroscopic inhomogeneities, the inversion layers can be considered as an inhomogeneous system consisting of many small macroscopic regions with different mobility edges. The model of localization for a homogeneous disorder system is used to deal with these small regions. Thus, the results obtained are in agreement with the experimental data, and the treatment is also conducive to the explanation of such "anomalous" effects as the change of mobility edge with electron Fermi energy and the appearance of magnetoconductance oscillations.