

文章编号:1001-5078(2004)03-0200-03

量子阱红外探测器掺杂阱中能级的计算

王 斌,邓 军,邢艳辉,李建军,李 兰,沈光地
(北京市光电子技术实验室,北京工业大学,北京 100022)

摘 要:量子阱中能级位置的确定是获得量子阱红外探测器其它设计参数的基础。为了提供足够的载流子跃迁,阱层一般为重掺杂层。重掺杂使半导体材料禁带宽度变窄,从而改变量子阱中能级的位置。通过对不同温度、量子阱区不同掺杂浓度条件下的量子阱材料 PL 谱进行测量,得出 PL 谱峰值波长对应的电子跃迁峰值能量,它与阱中基态能级的位置有关。分别计算了考虑和不考虑禁带变窄效应时的电子跃迁峰值能量,并与实验结果相比较,可以看出考虑禁带变窄效应时与实验结果相吻合,因此掺杂量子阱区能级的计算需要考虑禁带变窄效应,这样可以较为精确的得出阱中能级的位置。

关键词:量子阱红外探测器;光致发光(PL)光谱;重掺杂;能级计算

中图分类号:TN215 **文献标识码:**A

Energy Level Calculation of Doping Quantum Well for QWIP

WANG Bin, Deng Jun, XING Yan-hui, LI Jian-jun, LI Lan, SHEN Guang-di
(Beijing University of Technology, Beijing Optoelectronic Technology Lab, Beijing 100022, China)

Abstract: Achieving the energy level position in quantum wells of quantum well infrared photodetectors (QWIPs) is the base of designing QWIP other parameters. In order to get sufficient carriers, the quantum wells are often heavily doped. The heavily doping will narrow the forbidden gap and change the energy level in quantum wells. PL spectrum of QWIPs material at different temperature and doping concentration were measured. The maximum of electron transition energy was obtained, which is corresponded with the maximum of PL spectrum and is related with the position of the ground state energy level in quantum wells. The maximum of electron transition energy was respectively calculated when the effect of forbidden gap narrowing was considered or not. We contrasted the calculation result with the experimental result. The calculation result considering the forbidden gap narrowing is exactly corresponded with the experimental result. Therefore, when forbidden gap narrowing is considered, we can get more accurate energy level position in the heavily doping quantum wells.

Key words: quantum well infrared photodetector; photoluminescence(PL); heavy doping; energy level calculation

1 引 言

自 1987 年 Levine 研制出第一个 GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器以来,量子阱红外探测器以其优越的性能在 8~12 μ m 红外波段应用方面得到了迅速的发展。这是因为与 HgCdTe 材料探测器相比,量子阱红外探测器具有材料热稳定性和均匀性好、响应速度快、材料生长工艺与器件制备工艺成熟、抗辐照、成本低等优点。对于大规模焦平面阵列探测器而言,这些优点表现得更为明显。目前,量子阱红外探测器已经引起了许多商业、工业和军事等方面的关注。

量子阱红外探测器利用导带阱内基态载流子吸收红外辐射能量跃迁到高能态,并在外电场作用下输运,形成与入射光强成正比的光电流,实现对红外

辐射的探测。因此,基态能级在阱中位置的确定较为重要,它决定了探测器其它的设计参数,如量子阱宽度、势垒高度、探测峰值波长等。为了提供足够的载流子跃迁,量子阱层一般为重掺杂层(n 型或 p 型),重掺杂会使半导体材料发生简并化,禁带宽度变窄,从而改变量子阱中能级的位置。因此需要考虑重掺杂对阱中能级位置的影响。我们通过对不同温度不同掺杂浓度条件下对 GaAs/AlGaAs 量子阱层 PL 谱的测量,得出 PL 谱峰值波长对应的电子跃迁峰值能量,它与导带和价带量子阱中基态能级的位置有关。分别计算了不考虑和考虑重掺杂对禁带宽度影响时的能级位置,并与实验结果相比较,通过

作者简介:王 斌(1979-),男,硕士,目前从事新型量子阱红外探测器方面的研究。

收稿日期:2003-12-17

分析得出在确定量子阱中基态能级位置时,需要考虑重掺杂引起的禁带变窄效应。

2 实验

本实验所用两个样片是利用 MOCVD 技术在 (100) 半绝缘 GaAs 衬底上生长的。A 样片依次生长的结构为: 800nm 缓冲层, 36nm 本征 AlGaAs 层, 20 周期 3.6nm 重掺杂 GaAs 层与 36nm 本征 AlGaAs 层交替生长的量子阱结构, 500nm GaAs 帽层, 其中量子阱 GaAs 层掺杂浓度为 $1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, AlGaAs 层 Al 组分为 34.5%, 如图 1 所示。B 样片依次生长的结构为: 600nm GaAs 缓冲层, 40nm 本征 AlGaAs 层, 50 周期 3.6nm 重掺杂 GaAs 层与 40nm 本征 AlGaAs 层交替生长的量子阱结构, 600nm GaAs 帽层, 其中量子阱 GaAs 层掺杂浓度为 $8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, AlGaAs 层 Al 组分为 29%, 如图 2 所示。利用 Philips PLM 100 型 PL 谱测试仪器测得 A 样片室温和低温 (77K) 下的材料量子阱区 PL 谱峰值波长分别为 793.6nm (如图 3 所示)、764.5nm (如图 4 所示), 对应的电子跃迁峰值能量为 1.5625eV、1.6220eV, A 样片 PL 谱中的右侧峰是 GaAs 吸收峰, 测得 B 样片室温和低温下的材料量子阱区 PL 谱峰值波长为 787.9nm (如图 5 所示), 对应的电子跃迁峰值能量为 1.5738eV。

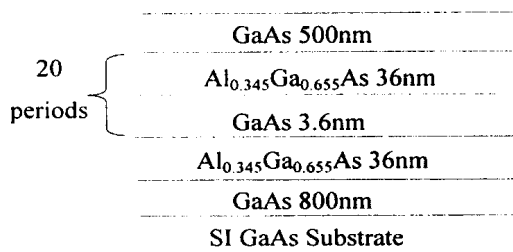


图1 样片A的生长结构

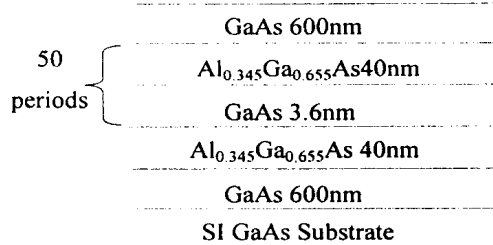


图2 样片B的生长结构

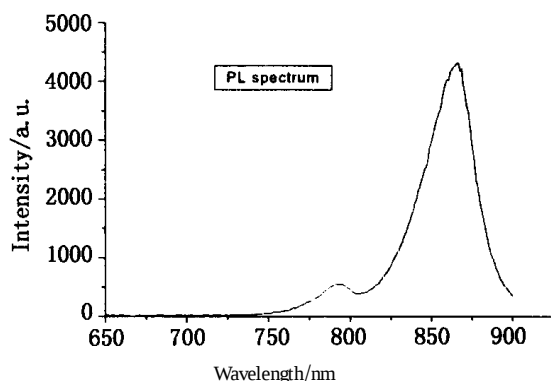


图3 样片A的室温PL谱

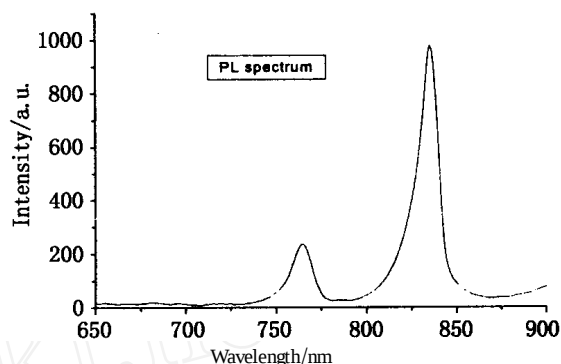


图4 样片A的低温PL谱

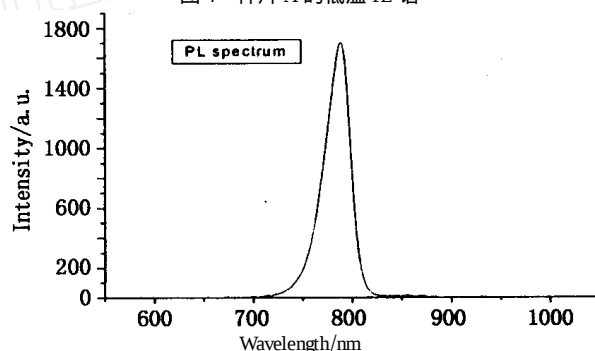


图5 样片B的室温PL谱

3 计算

PL 谱的峰值波长是由导带量子阱的基态能级与价带量子阱基态能级间的能量差决定的, 如图 6 所示。由图 6 可以看出 GaAs 禁带宽度、导带和价带量子阱中基态能级的位置决定了电子跃迁峰值能量, 即 PL 谱的峰值波长, 因此需求出导带和价带基态能级的位置从而确定电子跃迁峰值能量。

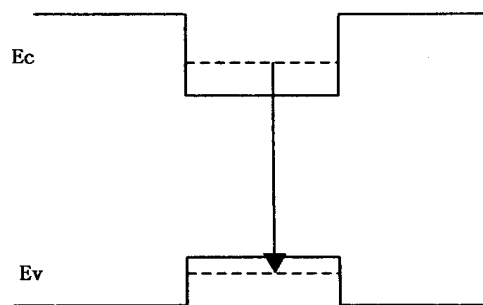


图6 量子阱PL能带示意图

不考虑掺杂浓度对带隙的影响时, GaAs 的禁带宽度为^[1]

$$E_g(T) = 1.519 - \frac{5.405 \times 10^{-4} T^2}{T + 204} \quad (1)$$

其中, T 为绝对温度。

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的禁带宽度为^[2]

$$E_g'(T, x) = \frac{A(T) + B(T)x + 130.24x^2}{225 + T + 88x} \quad (2)$$

其中, $A(T) = 341.87 + 1.5194T - 5.5 \times 10^{-4} T^2$,

$B(T) = 466.71 + 1.48T - 3.3 \times 10^{-4} T^2$ 。

取 $E_c/E_v = 0.6/0.4$ 。

一维有限深势阱的阱中能级满足 Schrodinger

方程^[3]

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\varphi = -k^2\varphi \quad (3)$$

量子阱中能级采用传输矩阵法计算。将量子阱沿生长方向离散为 n 层,使每一区间的范围足够小以保证在每一层内的势能近似为常数。在第 i 层内具有通解:

$$\varphi_i(x) = A_i \exp(ik_i x) + B_i \exp(-ik_i x) \quad (4)$$

其中 A_i, B_i 为待定的常数。相邻的各层间满足波函数连续和波函数的导数连续的边界条件,由此可以得到:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = S_1 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = S_1 S_2 \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \dots \\ = S_1 \dots S_{n-1} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\text{其中 } S_i(x_j) = \frac{1}{t_i} \begin{pmatrix} \exp(-ik_i x_j) & r_i \exp(-ik_i x_j) \\ r_i \exp(ik_i x_j) & \exp(ik_i x_j) \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$r_i = \frac{k_i - k_{i+1}}{k_i + k_{i+1}}, t_i = \frac{2k_i}{k_i + k_{i+1}} \quad (7)$$

矩阵 S 为波函数的传输矩阵。根据局域态波函数在两个方向无穷远处为零的条件得到边界条件。因此可知传输矩阵中矩阵元 $S_{11} = 0$ 即为特征方程,通过数值法求解特征方程可求得量子阱中的分离能级。

多量子阱红外探测器材料 PL 谱峰值波长对应的电子跃迁峰值能量为

$$E = E_{g\text{GaAs}} + E_{c1} + E_{v1} \quad (8)$$

其中, $E_{g\text{GaAs}}$ 为 GaAs 禁带宽度, E_{c1}, E_{v1} 分别为导带和价带量子阱中的基态能级。不考虑掺杂浓度对带隙的影响时,求得样片 A 室温下,低温下和样片 B 室温下材料 PL 谱峰值波长对应的电子跃迁峰值能量分别为 1.6723eV, 1.7575eV, 1.656eV。与测量值相比可知,不考虑掺杂浓度对带隙的影响时计算值与实验测得的电子跃迁峰值能量相差甚远。

4 分析

由公式(1)、(2)可知,随着温度的降低, GaAs 和 AlGaAs 材料的禁带宽度增大,因此低温下的电子跃迁峰值能量要比室温下的能量大。不考虑掺杂浓度对带隙的影响时,由理论计算得出 A 样片比 B 样片室温下的电子跃迁峰值能量大,这与实验测得的值相矛盾。因此,在计算能级时要考虑掺杂对带隙的影响。

当材料掺杂浓度较高时,半导体发生简并,杂质能级扩展为一个能带并进入导带或价带,形成新的简并能带,简并导带或价带的尾部伸入到禁带中,使禁带宽度变窄。掺杂浓度越大,禁带宽度就越窄,这就是杂质重掺杂引起的禁带变窄效应。实验表明,禁带变窄量与温度基本无关^[4]。假设砷化镓材料是

无补偿性的,并且所有的杂质均电离,则 n 型砷化镓中禁带变窄量 E_{gn} 与掺杂浓度的关系为^[5]

$$E_{gn} = 16.30 \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{3}} + 7.47 \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{4}} + 90.65 \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

其中, N 为 n 型 GaAs 中的掺杂浓度。

当考虑禁带变窄时, AlGaAs 与 n 型 GaAs 导带带隙差增加,增加量为 n 型 GaAs 的导带带隙收缩量,即为禁带变窄量 E_{gn} 。因此导带一维有限深势阱中能级满足的 Schrodinger 方程变为

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x) - E_{gn}] \varphi = -k^2 \varphi \quad (10)$$

利用传输矩阵法求得量子阱中基态能级位置。当考虑禁带变窄时,多量子阱红外探测器材料 PL 谱峰值波长对应的电子跃迁峰值能量为

$$E' = E_{g\text{GaAs}} - E_{gn} + E_{c1} + E_{v1} \quad (11)$$

因此考虑掺杂浓度对带隙的影响时,求得样片 A 室温下、低温下和样片 B 室温下材料 PL 谱峰值波长对应的电子跃迁峰值能量分别为 1.5617eV, 1.6488eV, 1.5720eV。与测量值相比可知,考虑掺杂浓度对带隙影响计算值与实验测得的电子跃迁峰值能量基本相同。

室温下,由于 A 样片量子阱中掺杂浓度较高,引起的禁带变窄量较大,电子跃迁峰值能量比 B 样片小。低温下,由于材料带隙增加,电子跃迁峰值能量增加。计算值与测量值相差较大是因为实验中对样片的制冷温度较高,并未达到 77K 所致。

5 结论

对利用 MOCVD 技术生长的 GaAs/AlGaAs 多量子阱红外探测器材料的 PL 谱峰值波长对应的电子跃迁峰值能量进行了分析。在不同温度和阱区不同掺杂浓度条件下,由理论和实验结果得出量子阱区掺杂浓度较高时能级的计算需要考虑重掺杂引起的禁带变窄效应。

参考文献:

- [1] 刘恩科,朱秉升,罗晋生,等. 半导体物理学[M]. 第4版,北京:国防工业出版社,1997:24-31.
- [2] Lorenzo Pavesi, Mario Gwzsi. Photoluminescence of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ alloys[J]. J. Appl. Phys., 1994, 75(5): 4779-4842.
- [3] Ajoy K Ghatak, K Thyagarajan, M R Shenoy. A novel numerical technique for solving the one dimensional schrodinger equation using matrix approach application to quantum well structures[J]. IEEE Journal of Quantum Electronics, 1988, 24(8): 1524-1531.
- [4] 肖志雄,郑荏,魏同立,等. 重掺杂硅费 oy 能级和少数载流子浓度的温度特性分析[J]. 低温物理学报, 1995, 17(2): 101-109.
- [5] S C Jain, D J Roulston. A simple expression for band gap narrowing(BGN) in heavily doping Si, Ge, GaAs and $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ strained layers[J]. solid state electronics, 1991, 34[5]: 453-461.