

赝形 δ 掺杂 AlGaAs/InGaAs/GaAs 量子阱 的光致发光性质研究*

王晓光 常勇 桂永胜 褚君浩

(中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家重点实验室, 上海, 200083)

曹昕 曾一平 孔梅影

(中国科学院半导体研究所新材料部, 北京, 100083)

TN304.23

摘要 测量了一系列不同隔离层(spacer)厚度、阱宽和 δ 掺杂浓度的单边掺杂的赝形高电子迁移率晶体管(p -HEMTs)量子阱的变温和变激发功率光致发光谱, 详细研究了(e1-hh1)和(e2-hh1)两个发光峰之间的动态竞争发光机制, 并运用有限差分法自洽求解薛定谔方程和泊松方程以得出电子限制势、子带能级以及相应的电子包络波函数、子带占据几率和 δ 掺杂电子转移效率, 研究了两个峰的相对积分发光强度随隔离层厚度、阱宽和 δ 掺杂浓度的变化。

关键词 p -HEMTs, 量子阱, 光致发光性质

δ 掺杂

砷化镓

半导体

PHOTOLUMINESCENCE STUDIES ON PSEUDOMORPHIC δ -DOPED AlGaAs/InGaAs/GaAs QUANTUM WELLS*

WANG Xiao-Guang CHANG Yong GUI Yong-Sheng CHU Jun-Hao

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

CAO Xin ZENG Yi-Ping KONG Mei-Ying

(New Material Department, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

Abstract Photoluminescence (PL) measurements were performed on several series of single-side Si-doped pseudomorphic high electron mobility transistors (p -HEMTs) quantum well (QW) samples, with different spacer layer widths, well widths and Si δ -doped concentrations, under different temperatures and excitation power densities. The dynamic competitive luminescence mechanism between the radiations of e2-hh1 and e1-hh1 was discussed in detail. The confining potential, subband energies, corresponding envelope functions, subband occupations and transferring efficiency etc., were calculated by self-consistent finite differential method at different temperatures in comparison with the present experiment results. The relative variation of the integrated luminescence intensity of the two transitions (e1-hh1 and e2-hh1) was found to be dependent on the temperature and the structure's properties, e. g. spacer layer width, dopant concentration and well width.

Key words p -HEMTs, quantum well, photoluminescence.

引言

赝形高电子迁移率晶体管材料的生长和特性对基础和应用研究具有重大意义. 赝形应变势阱层可在 $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs$ 结构中成功获

得, 并可得出与非应变材料不同的光谱特性^[1]. 调制掺杂量子阱结构(MDQWs)很适合在原理上和工艺上研究二维电子气系统(2DEG)的性质, 因为在这些结构中, 载流子从故意掺杂的高能隙转移到低能隙的阱中, 在阱中形成高密度、高载流子迁移率和饱

* 国家自然科学基金(编号 61876042)和“九五”国家重点科技攻关项目基金(编号 97-770-01-01)资助项目
稿件收到日期 2000-05-23, 修改稿收到日期 2000-06-28

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 61876042) and by the Foundation of State Scientific and Technical Key Items of the “Ninth-Five Plan” of China
Received 2000-05-23, revised 2000-06-28

和速度的准二维电子(空穴)气^[2,3].

应变使轻空穴和重空穴分离并引起 Γ 能谷向高能端移动.由于在InGaAs量子阱中,电子和空穴子带波函数的交迭增大,使光致发光效率大大增强,从而使得光致发光光谱成为一种研究 p -HEMTs结构的光电性质和晶体质量及研究载流子转移和能级之间的动态辐射复合机制的有效工具.

本文测量了一系列 δ 单边掺杂的 p -HEMTs $Al_{0.32}Ga_{0.78}As/In_{0.20}Ga_{0.80}As/GaAs$ 结构的变温和变激发功率光致发光光谱,通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程得出有效能带图、费米能级、电子和空穴子带能级以及二维电子气分布,与实验结果符合很好,并由此分析了(e1-hh1)和(e2-hh1)两个发光峰之间的竞争发光机制与不同隔离层(spacer)、阱宽和 δ 掺杂浓度之间的关系.

1 样品制备和实验

本文所用样品是在GEN I MBE系统上生长的,以半绝缘的GaAs(100)为衬底,首先生长GaAs缓冲层,然后依次生长未掺杂的 $In_xGa_{1-x}As$ 应变量子阱、未掺杂的 $Al_xGa_{1-x}As$ 隔离层、Si δ 掺杂层和 $Al_xGa_{1-x}As$ 源层,最后是GaAs覆盖层.Si δ 掺杂浓度为 $4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 和 $4.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$.隔离层宽度从20Å变到60Å,从而可以研究电子从 δ 掺杂层转移到 $In_xGa_{1-x}As$ 量子阱中的效率.本文所用样品A、B、C、D、E、F、G和H的结构参数列于表1中.图1

GaAs Cap	210 Å
i- $Al_{0.22}Ga_{0.78}As$	350 Å
Si δ -doping	$4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$
i- $Al_{0.22}Ga_{0.78}As$	40 Å
Spacer	
i- $In_{0.20}Ga_{0.80}As$	140 Å
i-GaAs-Buffer	4000 Å
SI-GaAs	

图1 样品C的纵向剖面

Fig.1 Cross sectional structure of sample C

表1 所用样品及其结构参数

Table 1 Samples used and their structure parameters

X 编号	阱宽	隔离层宽度	硅 δ 掺杂浓度(cm^{-2})
A	140	20	4×10^{12}
b	140	30	4×10^{12}
C	140	40	4×10^{12}
D	140	60	4×10^{12}
E	120	40	4×10^{12}
F	150	40	4×10^{12}
G	140	40	4×10^{12}
H	140	40	4.5×10^{12}

是一个典型的 p -HEMTs结构的沿生长方向的示意图.

光致发光测量以 Ar^+ 离子激光器的514.5nm谱线作为激发源,用Nicolet 800型傅立叶变换红外光谱仪(FTIR)测量样品的发光,分辨率为 4cm^{-1} .变温范围从4.2K到300K可调,典型激发功率约为 1W/cm^2 .探测器为室温下工作的硅光电二极管.

2 理论计算

为了从理论上分析实验数据,经典方法已经不能适用于 p -HEMTs结构,因为在这种结构中 δ 掺杂层和InGaAs阱中形成了离子限制态.本文中,我们通过自洽量子机制计算有效能带结构和跃迁能量,分析了 $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs$ 调制掺杂结构在不同温度下的主要发光峰,得出材料的结构参数即隔离层宽度、阱宽和 δ 掺杂浓度对子能级之间竞争辐射复合发光的影响情况^[4,5].光致发光峰的指认可以通过理论上分别计算阱中价带和导带子能级的位置来确定.

运用有限差分法自洽求解薛定谔方程和泊松方程,系统的本征态可由电子、重空穴、轻空穴和自旋轨道分裂态为基矢展开.交换相关能可以用局域态密度(LDA)近似计算.认为GaAs覆盖层有一个自由的表面,其表面施主和受主态通过将费米能级钉扎在靠近禁带中线的值 $E_c - 0.7 \text{eV}$ ^[6]而加以考虑.电子从硅 δ 掺杂层转移到InGaAs量子阱中的效率定义为量子阱中的载流子浓度和总掺杂浓度的比值,这个转移效率在程序运行过程中是随自洽得到的载流子浓度分布而不断变化的,它直接影响着量子阱中费米能级的位置.研究不同样品结构的电子转移效率对器件的设计无疑具有重大的意义.

图2是样品C在4.2K下的能带结构和载流子浓度分布计算结果,横坐标是从GaAs覆盖层沿生长方向指向衬底.图中还标出了阱中费米能级 E_f 和各电子和重空穴子能级的位置,其中第一和第二电子子能级的占据几率分别为0.77和0.19,这里的电子子能级占据几率定义为子能级上的电子浓度和阱中总电子浓度的比值.从价带或导带的形状,我们可以看出, δ 掺杂层使得隔离层和靠近隔离层的InGaAs阱发生强烈的能带弯曲,最后在阱中形成一个三角势阱,阱深约为161meV,阱中有两个电子子能级,费米能级在e2能级以上,这与实验观测到的e2-hh1发光强度大于e1-hh1的结果是相符的.

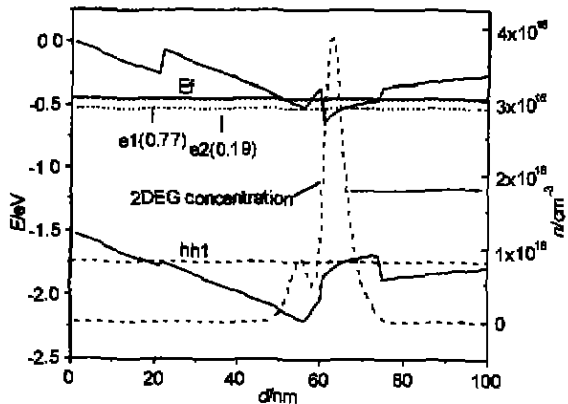


图 2 样品 C 在 4.2K 下通过自洽计算得到的能带图(实线),自由载流子密度(虚线),费米能级 E_F ,束缚电子子能级 $e_i(i=1,2)$ 和重空穴子能级 hh1(圆括号中的数值是相应电子子能级的占据几率)

Fig. 2 The results from self-consistent calculation of the band structure (solid lines), free electron density (dashed line), Fermi level E_F , excited electron states $e_i(i=1,2)$ and excited heavy-hole state hh1 which are localized in the InGaAs well for sample C at 4.2K. The values in parentheses are the probability densities of the corresponding electron subband levels

3 结果与讨论

图 3 是样品 C 在不同温度下的光致发光光谱,由 e1-hh1 和 e2-hh1 两个发光峰组成. 理论计算表明, Si δ 掺杂增强了 e2 和 hh1 这两个子能级波函数之间的交迭,甚至会比 e1 和 hh1 之间的交迭大好几倍,这和图中观测到的 e2-hh1 峰比 e1-hh1 峰强得多的现象是一致的. 这个现象也表明费米能级应该在 e2 子能级以上,与图 2 中的理论计算结果符合. 实验中我们没有观测到和 e3 及 hh2 子能级相关的发光峰. 从图 2 的能级图可以看出,费米能级基本上已经溢出 InGaAs 三角阱, e3 能级更在费米能级以上,所以对载流子的限制作用很弱,理论计算也表明 e3 子能级上电子占据几率只有 0.04,因此,与 e3 子能级相关的发光很弱,以致于没有观测到. 从光谱图中可以看到 e1-hh1 和 e2-hh1 的发光峰很强,以致掩盖了和 hh2 有关的发光峰^[7,8]. 这样,我们得到了合适的分析 e1-hh1 和 e2-hh1 之间的竞争跃迁发光机制的样品.

图 4 是样品 E 在不同温度下的光致发光光谱,从图中可以看出,当温度 $T \geq 50K$ 时,谱线的高能端显著展宽;而在 $T \leq 50K$ 时,线型不随温度变化,展宽主要在低能端. 峰位随着温度的升高的变化是先有一个小的蓝移(最大值约为 4.5meV),然后再红

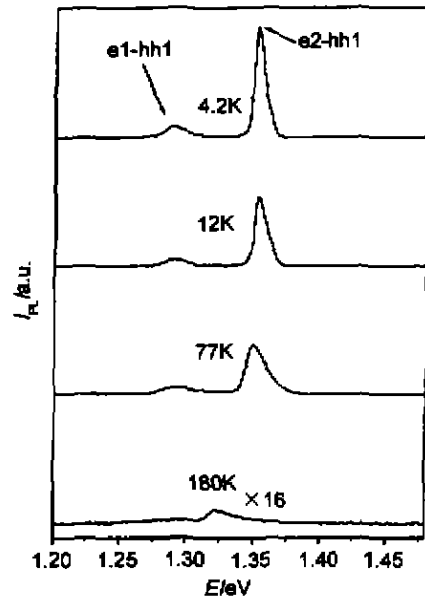


图 3 样品 C 在不同温度下的光致发光谱
Fig. 3 PL spectra of sample C at different temperatures

移. 从这些现象可以看出,载流子在 $T \geq 50K$ 时获得热平衡(“热化”),而在 $T \leq 50K$ 时,载流子由于局域化而未能达到热平衡. 为了定量地分析光谱线型随温度的变化,我们运用一个分析量子阱中子带跃迁发光线型随温度变化关系的模型^[9]来拟合我们的实验数据. 这个模型使用玻耳兹曼分布 $\exp(-E/k_B T)$ 拟合发光峰,其中 E 是载流子能量, k_B 是玻耳兹曼常数, T 是热载流子温度. 按照这个模型,子能级之间的光学跃迁矩阵元认为是常数并不随发射能量改变. 另外,对辐射复合有贡献的电子和空穴被认为

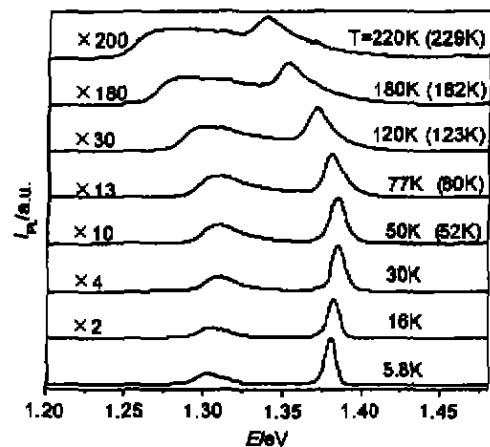


图 4 样品 E 在不同温度下的光致发光谱(圆括号里的数值是拟合得的热载流子温度)
Fig. 4 PL spectra of sample E at different temperatures (the values in parentheses are the hot carrier temperature)

为是自由的,密度以联合态密度(JDOSs) $D(E)$ 描述. 这样,光致发光强度 $I(E)$ 可以表示为

$$I(E) \propto f(E)\exp(-E/k_B T_c), \quad (1)$$

其中, $f(E)$ 是联合态密度和高斯函数 $G(E) = \exp(-E^2/\Gamma^2)$ 的卷积, Γ 是一个展宽因子, 并有

$$f(E) = \int D(E')G(E - E')dE'. \quad (2)$$

图4中圆括号里的温度值是用上述模型拟合 e2-hh1 发光峰所得的热载流子温度 T_c , 可以看出与测量温度相差很小, 这说明激发光对样品的加热作用很小. 由上述的拟合过程可以看出, 在 $T \leq 50K$ 时, 发光峰线型变化不是由热化载流子引起的, 而是由于合金无序引起局域化的起伏势, 对载流子相互间达到热平衡的阻碍作用引起的. 从光致发光谱中可以得出热化能量大约为 $k_B \cdot 50K (\sim 4.3meV)$. 当载流子获得 4.3meV 热能时, 就可以从这些局域态中激发出来, 从而可以达到平衡. 这个热化能量和峰位从 4.2K 到 50K 的最大蓝移 4.5meV 是一致的. 当 $T \geq 50K$ 时, 发光峰位红移是由于量子阱中带隙随温度升高而缩小的效应引起的. 图5给出了样品E的 e1-hh1 和 e2-hh1 两个发光峰峰位随温度变化的关系图, 从图上可以清楚地看出峰位随温度的升高先蓝移后红移的现象. 对其他样品做相同的分析, 都有类似样品E的现象.

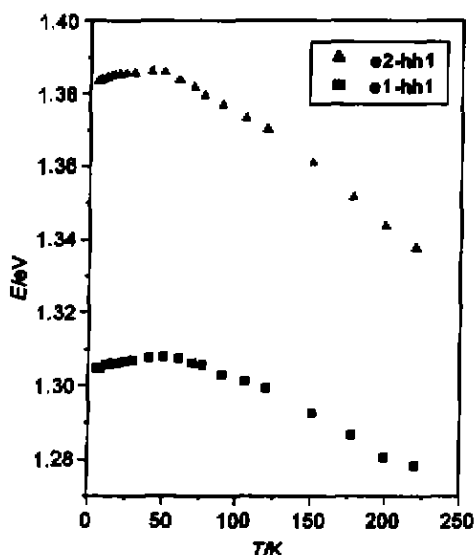


图5 样品E的(e1-hh1)峰和(e2-hh1)峰峰位随温度的变化关系
Fig. 5 Temperature dependence of the energies of the transitions (e1-hh1) and (e2-hh1) for sample E

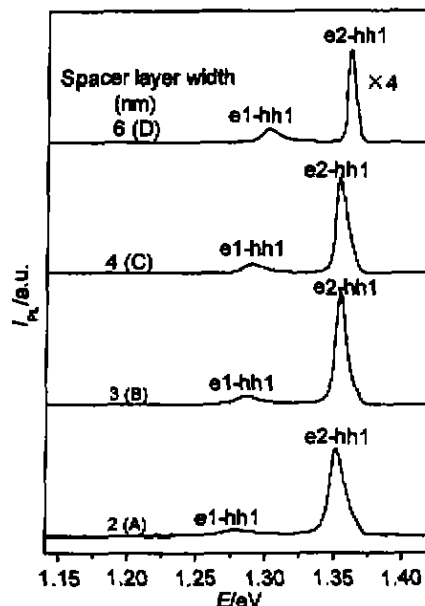


图6 具有不同隔离层宽度的样品A、B、C和D在4.2K下的PL谱
Fig. 6 PL spectra at 4.2K obtained from samples A, B, C and D, with different spacer layer widths

图6和图7给出了光致发光峰随隔离层厚度、阱宽和 δ 掺杂浓度分别变化的情况. 可以看出, 当阱宽增大时, e1-hh1 和 e2-hh1 两个发光峰的峰位均发生红移, 当阱宽从 120Å 变化到 150Å 时, e1-hh1 峰位红移量为 31.5meV, 这和能带计算得出的 29.4

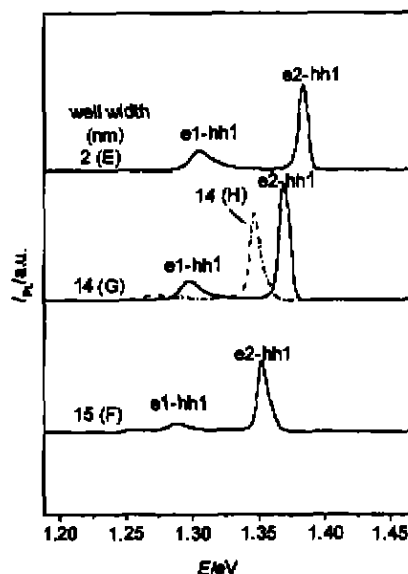


图7 具有不同阱宽和掺杂浓度的样品E、F、G和H在4.2K下的PL谱
Fig. 7 PL spectra at 4.2K from samples E, F, G and H, with different well widths

meV 是一致的. 这个红移显然是由于阱宽增大引起量子阱中能级更靠近带底而引起的. 从图 7 中样品 H (掺杂浓度为 $4.5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$) 和样品 G (掺杂浓度为 $4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$) 的比较中可以看出, 当 Si 掺杂浓度增大, 发光峰有明显的红移, e1-hh1 峰的红移量为 23.4meV, 和理论计算值 21.8meV 相近. 这是由于 Si 掺杂浓度的增大, 使得转移到 InGaAs 量子阱中的电子增多, 势能降得更低, 从而三角阱的斜率增大引起子能级位置朝带底移动而引起的. 从图 6 可看出, 随着隔离层从 60 Å 减小到 20 Å, δ 掺杂层上的电子转移到 InGaAs 势阱的效率逐渐增大, 同上面的道理一样, 也引起三角阱斜率增大, 从而使子能级朝带底移动, 发光峰峰位红移与文献[8]中提到的随 δ 掺杂浓度增大、静电诱发的斯塔克效应而使能带弯曲的结果是一样的. 对 e2-hh1 峰, 红移量为 8.6meV, e1-hh1 峰红移量为 23.0meV, 理论计算值分别为 8.5meV 和 22.1meV, 符合得很好. 定量地分析这些峰位移动随隔离层厚度、阱宽和掺杂浓度的变化关系对材料生长和器件设计有原理上的指导作用.

4 结论

本文报道了成系列的赝形 Si δ 掺杂 AlGaAs/InGaAs/GaAs p -HEMTs 材料的发光光谱, 观察到了从第一电子子能级到第一重空穴子能级, 从第二电子子能级到第一重空穴子能级间的两个强发光峰. 通过变化隔离层厚度、阱宽和 δ 掺杂浓度来改变三角阱的形状以引起费米能级和各子能级移动, 及电子从 δ 掺杂层穿越隔离层到 InGaAs 量子阱的转移效率来研究这两个发光峰在不同温度和不同激发功率下相互之间的竞争发光机制. 我们运用有限差分法自洽求解薛定谔方程和泊松方程得出能带结构、费米能级、各电子重空穴能级和二维电子气浓度, 并和实验观察到的(e1-hh1)和(e2-hh1)两个强发光峰的变化比较, 得到了一致的结果, 由此也进一

步定量地验证了光致发光光谱随材料参数的变化情况, 为 p -HEMTs 结构的材料生长和器件设计提供了一种无损伤的光学测试手段, 并可用于材料的质量评估.

致谢 作者感谢上海交通大学沈文忠教授的有益指导.

REFERENCES

- [1] SHEN Wen-Zhong, TANG Wen-Guo, SHEN Xue-Chu. Spectroscopic studies of δ -doped HEMTs $\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{As}/\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$, *Acta Physica Sinica* (沈文忠, 唐文国, 沈学忠. δ 掺杂的赝形高电子迁移率晶体管 AlGaAs/InGaAs/GaAs 结构的光谱研究, 物理学报), 1995, **44** (5), 111
- [2] Schmitt-Rink S, Ell C, Haug H. Many-body effects in the absorption, gain, and luminescence spectra of semiconductor quantum-well structures, *Phys. Rev. B*, 1986, **33**: 1183
- [3] Chen W, Fritze M, Walecki W, et al. Excitonic enhancement of the Fermi-edge singularity in a dense two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. B*, 1992, **45**: 8408, 8464
- [4] Cuesta J A, Sanchez A, Niguez-Adame F Domi. Self-consistent analysis of electric field effects on Si δ -doped GaAs, *Semicond. Sci. Technol.*, 1995, **10**: 1303
- [5] Bouzaiene L, Sfaxi L, Sghaier H, et al. Improvement of the electron density in the channel of an AlGaAs/GaAs heterojunction by introducing Si δ -doping in the quantum well, *J. Appl. Phys.*, 1999, **85**: 8223
- [6] Jogai B. Self-consistent $k \cdot p$ band structure calculation for AlGaAs/InGaAs pseudomorphic high electron mobility transistors, *J. Appl. Phys.*, 1994, **76**: 2316
- [7] Yu P W, Jogai B. Temperature dependence of photoluminescence in modulation-doped pseudomorphic high electron mobility transistor $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$ structures, *J. Appl. Phys.*, 1994, **76**: 7535
- [8] LU Wu, NG Geok-Ing, Jogai B. Identification of room temperature photoluminescence in pseudomorphic modulation-doped AlGaAs/InGaAs/GaAs quantum wells, *J. Appl. Phys.*, 1997, **82**: 1345
- [9] Teo K L, Colton J S, Yu P Y, et al. An analysis of temperature dependent photoluminescence line shapes in InGaN, *Appl. Phys. Lett.*, 1998, **73**(12): 1697