

n型半导体量子阱红外探测器的 正入射吸收机制*

徐文兰 沈学础

(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;
微结构科学技术高等研究中心, 江苏, 南京, 210093)

傅英 M. Willander

(Department of Physics and Measurement Technology, Linköping University, S-58183, Sweden)

摘要 基于有效质量理论, 从导带子带间光跃迁矩阵元的表达式出发, 推出 n 型半导体量子阱红外探测器的正入射吸收条件. 用一些简单的数学手段, 把正入射的吸收系数表达为量子阱生长方向的解析函数, 进而讨论正入射吸收的优化、极限及与平行吸收的比较. 在考虑了椭球等能面的简并度和占有度后, 在掺杂浓度为 10^{18}cm^{-3} 和探测波长 $10 \mu\text{m}$ 时, 对 4 种具体的量子阱材料进行了计算. 推荐了为获取最大正入射吸收的优化量子阱生长方向, 为正入射量子阱探测器的设计提供依据.

关键词 量子阱, 红外探测器, 正入射.

引言

随着 MBE 等先进材料生长工艺的日臻完善, 半导体量子阱红外探测器正以其材料均匀性好、可调参数多、响应速度快等优点, 与传统的 HgCdTe 体材料探测器相比美. 但是目前比较成熟的 n 型 GaAs-GaAlAs 量子阱探测器对于正入射光是不吸收的, 这是由导带子带间跃迁选择定则所决定的. 因而要使用波导、光栅等结构使正入射光改变方向, 才可以使量子阱产生红外吸收. 90 年代初, 国际上开始探讨可以直接吸收正入射的量子阱探测器^[1~3], 其中, 利用导带电子有效质量非各向同性的非直接带隙半导体是解决正入射吸收的一种重要量子阱材料, 这种材料的正入射吸收特性与量子阱生长方向密切相关. 然而, 由于计算的复杂性, 以往在这方面的讨论仅限于某些具体的方向. 本文调动一些数学手段, 把吸收系数表示为量子阱生长方向的解析函数. 这样不但可以讨论优化、极限等比较深入的问题, 而且为实验研究提供了简便的计算方法. 在实际体系中, 根据掺杂浓度, 电子将从最低能谷开始填充, 量子阱对正入射光的总吸收系数应是各占有谷电子吸收系数之和. 这样, 就有

* 国家自然科学基金资助项目

本文 1994 年 9 月 23 日收到, 修改稿 1995 年 1 月 23 日收到

必要考虑原先在体材料中简并的那些能谷(X 电子—6 度简并, L 电子—4 度简并)在量子阱情况下的分裂. 最后, 我们对 4 种常见的 AlAs/AlGaAs、GaAlSb/AlSb、Si/GeSi 和 Ge/GeSi 作了计算, 结果表明, 对于掺杂浓度为 10^{18}cm^{-3} , 探测波长为 $10\mu\text{m}$ 的量子阱, 生长的最优方向为 [110] 方向.

1 子带间跃迁矩阵元以及正入射吸收条件

假设量子阱生长方向为 z 轴, 阱平面为 xy 平面. 导带电子波函数可以表示为

$$\psi_m(\vec{K}) = \phi_m(z)u(\vec{r})e^{j\vec{k}\cdot\vec{\rho}}, \quad (1)$$

式中 $u(\vec{r})$ 为 Bloch 函数, $\vec{K}(K_x, K_y)$ 为 xy 平面内波矢, $\vec{\rho}$ 为 xy 平面内位矢, $\phi_m(z)$ 为包络函数. 这样, 由光激发的电子子带间跃迁矩阵元为 $\langle\psi_m(\vec{K})|\vec{A}\vec{W}\vec{P}|\psi_n(\vec{K})\rangle$, 这里 \vec{A} 是矢势, \vec{P} 为动量算符, \vec{W} 为逆有效质量矩阵. 在文献[4]中, 我们已对此作了详细推导. 利用 Bloch 函数和包络函数的性质, 可以得到

$$\langle\psi_m(\vec{K})|\vec{A}\vec{W}\vec{P}|\psi_n(\vec{K})\rangle = \delta_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_i A_i W_{iz} \langle\phi_m(z)|P_z|\phi_n(z)\rangle. \quad (2)$$

式中, A_i 为 \vec{A} 的分量, W_{iz} 为 \vec{W} 分量, P_z 为 \vec{P} 的 z 分量. 从式(2)可见, 导带子带间跃迁要求 xy 平面内动量守恒, 而且就是包络函数之间的跃迁. 从式(2)还可以看出, 对于正入射, $A_x = 0$, 因此仅当 W_{xx} 或 W_{yy} 不为零时, 正入射跃迁矩阵元才不为零. 这样, 我们就可以得到 n 型半导体量子阱正入射吸收条件为: (1) 量子阱材料的电子有效质量必须是各向异性的, 即有椭球等能面; (2) 这样的量子阱生长方向还必须偏离椭球等能面的主轴. 最近, 我们又发展了两种非常直观的方法来推导正入射吸收条件, 结论与上述完全一致, 而物理图像更清晰, 我们将另文报道.

2 逆有效质量矩阵元

从前一节分析可见, 逆有效质量矩阵元在决定正入射吸收条件中起了关键的作用. 对于非直接带隙的半导体材料, 在主轴坐标系(XYZ)中, 电子逆有效质量 \vec{W}_p 是对角的. 如对于长轴在(001)的 X 电子, 有

$$\vec{W}_p = \begin{pmatrix} w_x & 0 & 0 \\ 0 & w_y & 0 \\ 0 & 0 & w_z \end{pmatrix}, \quad (3)$$

式中 $w_x = 1/m_x$, $w_y = 1/m_y$, m_x 和 m_y 为横、纵有效质量. 但如果量子阱生长方向 $z[l, m, n]$ 不与任一主轴重合, 则在新坐标系(x, y, z)中 \vec{W} 就有了非对角矩阵元

$$\vec{W} = \vec{T}^r \vec{W}_p \vec{T}, \quad (4)$$

\vec{T} 为坐标系 (x, y, z) 和 (X, Y, Z) 的变换阵, \vec{T}^r 是 \vec{T} 的转置阵. 为求 \vec{W} 的非对角元, 常规办法是先设法求变换阵 \vec{T} 和 \vec{T}^r , 然后根据式(4)求 \vec{W} . 对于 L 电子, 因其主轴坐标系不与 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 坐标系重合, 与式(4)对应的是 5 个矩阵相乘, 情况就更复杂, 而且不利于对所有生长方向的全面讨论研究. 下面, 我们发展了一系列方法来代替上述常规计算.

首先, 在把量子阱生长方法定为 z 方向后, x, y 方向只要在量子阱平面上即可, 有一定任意性. 现在, 我们选 y 轴不但垂直 z 轴, 且还垂直于椭球等能面的长轴方向, 这样, 在坐标系 (x, y, z) 中, 立刻就可确定 $W_{yy} = w_i, W_{xy} = W_{yx} = 0$. 又由于坐标变换是一个线性变换, 如 $w_i = w_l$, 则 \vec{W} 在主轴坐标系 (X, Y, Z) 中是一个数量阵, 这样的阵在任何坐标变换中都是不变的. 这样, 我们又可推出当 w_i 不等于 w_l 时, W_{xx} 为 w_i 和 w_l 的线性函数, 而且, 在 w_i 和 w_l 前的系数之和为 1, 即

$$W_{xx} = (1-a)w_i + aw_l. \quad (5)$$

此外, 又注意到椭球等能面在坐标变换中的 4 个不变量, 可以推出下列两个关系式^[5]:

$$W_{xx}W_{zz} - W_{xz}^2 = w_i w_l, \quad (6a)$$

$$W_{xx} + W_{yy} = w_i + w_l. \quad (6b)$$

从而可以得到

$$W_{xx} = \sqrt{a(1-a)}(w_i - w_l). \quad (7)$$

至此, 我们已方便地得到了 \vec{W} 的所有矩阵元. 文献[6]已讨论了 a 的求解, 此处不再赘述. 表 1 给出了对于 X、L 电子不同谷时 a 的表达式. 我们可以发现, 对于 X 电子, a 其实就是生长方向的方向余弦之平方.

表 1 X 谷和 L 谷的参数 $a(r^2 = l^2 + m^2 + n^2)$

Table 1 The parameter a for X valleys and L valleys ($r^2 = l^2 + m^2 + n^2$)

X 谷		L 谷	
主长轴	ar^2	主长轴	$3ar^2$
$[100]$	l^2	$[111]$	$(l+m+n)^2$
$[010]$	m^2	$[\bar{1}11]$	$(-l+m+n)^2$
$[001]$	n^2	$[1\bar{1}1]$	$(l-m+n)^2$
		$[11\bar{1}]$	$(l+m-n)^2$

3 吸收系数

略去与本文讨论无关的物理量, 由文献[4]可知, 单谷的导带子带间跃迁正入射吸收系数

$$\alpha_{\perp} = W_{xx}^2 / W_{zz}^{3/2} = \frac{a(1-a)(w_t - w_l)^2}{[(1-a)w_t + aw_l]} \quad (8)$$

显然, α_{\perp} 达到极大值的条件为

$$a = \frac{(3w_t + w_l) - \sqrt{(w_t + w_l)^2 + 12w_t w_l}}{2(w_t - w_l)} \quad (9)$$

对于平行入射, 有

$$\alpha_{\parallel} = \sqrt{W_{xx}} = \sqrt{(1-a)w_t + aw_l} \quad (10)$$

一般情况下, α_{\parallel} 大于 α_{\perp} . 但当电子有效质量各向异性足够大时, 即 $m_l \geq 5.828m_t$ 时, 可望在某些生长方向上获得比平行入射吸收大的正入射吸收, 详见文献[4]的推导.

在实际计算中, 因为总的吸收系数是各占有谷吸收系数之和, 有必要考虑量子阱材料中导带电子能谷的简并度和占有度. 在无穷深阱近似下, 电子 z 方向基态能 E_0 为

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar W_{xx}}{2L_w^2} = \frac{\pi \hbar^2}{2L_w^2} [(1-a)w_t + aw_l] \quad (11)$$

L_w 为阱宽. 对于某一生长方向 (l, m, n) , 由于不同谷的 a 表达式不同 (见表 1), 就有不同的 E_0 值, 具有最低 E_0 值 (我们将它表示为 E_{01}) 的谷将首先为电子所填充. 对于不同的生长方向, 最低能谷及其简并度 g 都不同, 表 2 列出了我们的计算结果.

表 2 最低能谷的简并度 g

Table 2 The degeneracy g of the lowest energy valley

X 谷			L 谷		
$[lmn]$	g	占有谷	$[lmn]$	g	占有谷
$l=m=n$	6	全部	$l=m=0$	4	全部
$l=m>n$	4	$[100][010]$	$n=0$	2	$[111][\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
$l>m>n$	2	$[100]$	其它	1	$[111]$

另一个问题是确定电子的费密能级, 以便确定电子填充到什么水平. 电子在量子阱平面内的能量 $E_{\vec{k}}$ 为^[7]

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(W_{xx} - \frac{W_{xx}^2}{W_{zz}} \right) K_x^2 + 2 \left(W_{xy} - \frac{W_{xx} W_{yz}}{W_{zz}} \right) K_x K_y + \left(W_{yy} - \frac{W_{yz}^2}{W_{zz}} \right) K_y^2 \right] \quad (12)$$

由上一节的讨论可知

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{w_t w_l}{W_{zz}} K_x^2 + w_l K_y^2 \right) \quad (13)$$

因此二维态密度为

$$N_{2D} = m_d / \pi \hbar^2, \quad (14)$$

其中 m_d 为二维态密度有效质量, 并且有

$$m_d = \sqrt{[(1-a)w_t + aw_l] / w_t^2 w_l} \quad (15)$$

在低温极限下,电子面密度 N_s 与费密能 E_f 的关系为

$$N_s = g N_{2D} (E_f - E_{01}). \quad (16)$$

由式(11),我们可以求出次低能谷基态与最低能谷基态的能量差 $E_{02} - E_{01}$. 对于探测波长为 $10\mu\text{m}$ 的量子阱,

$$E_{02} - E_{01} = [41.33(a - a')(w_i - w_l)] / [(1 - a)w_i + aw_l] (\text{meV}), \quad (17)$$

式中, a 和 a' 分别为最低能谷和次低能谷的参数 a 值,可从表 1 求得. 对于掺杂浓度为 10^8cm^{-3} 的阱材料,

$$E_f - E_{01} = 2.39 \sqrt{w_i^2 w_l / g} \sqrt{(1 - a)w_i + aw_l} (\text{meV}). \quad (18)$$

对低生长指数的 AlAs/AlGaAs、GaAlSb/AlSb、Si/GeSi 和 Ge/GeSi 量子阱,比较式(17)和(18),可以断言,电子只占据最低能谷. 因此,总的正入射吸收系数为

$$\alpha_i = g \frac{a(1 - a)(w_i - w_l)^2}{[(1 - a)w_i + aw_l]^{3/2}}. \quad (19)$$

表 3 给出了一些优化方向的计算结果. 我们发现,上述 4 种量子阱的最优生长方向均为 [110] 方向. 而电子有效质量各向异性最大的 Ge 材料,其正入射吸收为最大. 对于更高浓度的掺杂,或其它探测波长,式(17)、(18)表达不同,结论也可能有差异,但计算原则与前面所述是一样的.

表 3 量子阱的优化生长方向和总的吸收系数

Table 3 The optimal growth direction of QW and the total absorption coefficient

阱材料	生长方向	占有谷	α_i (任意单位)
AlAs	[110]	[100][010]	3.50
	[111]	全部	3.40
GaAlSb	[110]	[111][111]	3.23
	[100]	全部	2.90
	[102]	[111][111]	2.86
Si	[110]	[100][010]	3.23
	[111]	全部	3.18
Ge	[110]	[111][111]	6.31
	[203]	[111][111]	5.93
	[102]	[111][111]	5.26

4 结论

本文系统地研究了 n 型半导体量子阱红外探测器的正入射吸收机制,提供了计算逆有效质量矩阵元的简单方法,获得了正入射吸收系数用生长方向表达的解析式,从而可以方便地考虑正入射吸收的极限、优化及与平行入射吸收的比较问题. 在考虑了电子能谷的简并度和占有度后,推荐了常见的 n 型半导体量子阱生长的优化方向. 所有这些,可望对于高性能

的正入射吸收 n 型量子阱探测器的设计有所启发和帮助。

参考文献

- 1 Katz J. *et al. Appl. Phys. Lett.*, 1992, **61**:1697
- 2 Xie H, *et al. J. Appl. Phys.*, 1991, **70**:3152
- 3 Lee C, Wang K L *Appl. Phys. Lett.*, 1992, **60**:2264
- 4 Xu Wenlan, *et al. Phys. Rev.*, 1994, **B49**:13760
- 5 Xu Wenlan, *et al. J. Appl. Phys.*, 1994, **75**:3208
- 6 Xu Wenlan, *et al. Phys. Rev.*, 1993, **B48**:11477
- 7 Stern F, *et al. Phys. Rev.*, 1967, **163**:816

THE MECHANISM OF NORMAL-INCIDENCE ABSORPTION FOR n-TYPE SEMICONDUCTOR QUANTUM WELL INFRARED DETECTOR*

Xu Wenlan Shen Xuechu

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences,
Shanghai 200083, China; Center of Advanced Studies for Science and Technology of Microstructures,
Nanjing, Jiansu 210093, China)

Fu Ying M. Willander

(Department of Physics and Measurement Technology, Linköping University, S-58183, Sweden)

Abstract Based on the effective mass theory, the condition of normal-incidence absorption of intersubband transitions for n-type semiconductor quantum well (QW) infrared detector was derived by using the expression of matrix element of intersubband transition in the conduction band. Using some simple mathematical methods, the absorption coefficient of normal-incidence radiation can be represented as an analytical function of the growth direction of QWs. The optimization, the limitation of normal-incidence absorption and the comparison between it and parallel-incidence absorption were discussed. By considering the degeneracy and the occupancy of the ellipsoidal constant energy surface, the calculation for four kinds of QWs material was presented for the doping concentration of 10^{18} cm^{-3} and detecting wavelength of $10 \mu\text{m}$. Some optimal growth directions of QWs for the largest normal-incidence absorption were proposed, which are useful for the design of the novel QWs infrared detectors.

Key words quantum wells, infrared detectors, normal incidence.

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China