

GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱红外 探测器光吸收计算

范卫军 夏建白

(超晶格国家重点实验室 中国科学院半导体研究所 北京 100083)

摘要 本文在有效质量理论上计算了 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱子带间光吸收谱以及电子态密度。具体讨论了两种情况的吸收。第一种情况是量子阱中只存在一个基态;第二种情况是量子阱中存在一个基态同时还存在一个激发态。最后与有关实验进行比较。

PACC: 7360F, 7865

1 引言

随着超晶格量子阱的研究和发展,带间光吸收的理论和实验已有许多报道^[1-4]。八十年代中期 West^[5] 等人首次从实验上观察到在调制掺杂 GaAs/AlGaAs 多量子阱中子带间跃迁所引起的强红外吸收。之后,多量子阱子带跃迁的红外吸收实验研究引起了人们广泛注意^[6-10]。相应的理论计算也有了报道^[11]。用多量子阱制成的红外探测器具有许多优点,如响应速度快,探测率高,探测波长可以通过改变量子阱参数调谐。为了更好地研究和设计多量子阱红外探测器,进行这方面的理论计算是有意义的。本文着重计算和讨论量子阱中只有一个基态和阱中存在一个基态和一个激发态两种情况的光吸收。

2 计算方法

量子阱中电子在垂直于生长方向(假定沿 Z 方向)的平面内自由运动,在 Z 方向受到周期势的限制,使能级量子化。电子的能量可表示如下:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + \epsilon_n(k_{\perp}) \quad (1)$$

电子相应的波函数表示为:

$$\phi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp[i(k_x x + k_y y)] \sum_m C_m^n \exp\left[i\left(k_z + m \frac{2\pi}{L}\right)z\right] \quad (2)$$

其中, m^* 为电子有效质量, L 为多量子阱周期, $\mathbf{k} = (k_{\parallel}, k_{\perp})$, $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$, V 为多量子阱体积。

(1) 式中量子化能级可从下式求出,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_e(z) \right] \varphi_n(k_x, z) = \epsilon_n(k_x) \varphi_n(k_x, z) \quad (3)$$

$$\varphi_n(k_x, z) = \sum_m C_m^* \frac{1}{\sqrt{L}} \exp \left[i \left(k_x + m \frac{2\pi}{L} \right) z \right] \quad (4)$$

其中 $\varphi_n(k_x, z)$ 为沿 Z 方向的电子波函数, V_e 为势垒高度, C_m^* 为展开系数.

知道了导带电子能级(1)式, 就可以求出电子态密度 $G(E)$.

$$\begin{aligned} G(E) &= \sum_n \sum_k \delta(E - E_n(k_{||}, k_x)) \\ &= \sum_n \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} dk_x \int_0^\infty 2\pi k_{||} dk_{||} \delta \left[E - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*} - \epsilon_n(k_x) \right] \\ &= \sum_n \frac{Vm^*}{2\pi^2 \hbar^2} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} dk_x Y[E - \epsilon_n(k_x)] \end{aligned} \quad (5)$$

其中 Y 为阶梯函数,

$$Y(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad (6)$$

假定量子阱中掺杂浓度为 n , 垒中不掺杂, 则量子阱有效掺杂电子浓度 n^* 可表示为:

$$n^* = \frac{l}{l+d} n \quad (7)$$

其中 l 为阱宽, d 为垒宽. 费米能级 E_F 可从下式求出.

$$n^* = \int_0^{E_F} G(E) f(E) dE \quad (8)$$

其中 $f(E)$ 为费米分布函数,

$$f(E) = 1 / \{ 1 + \exp[(E - E_F)/kT] \} \quad (9)$$

其中 k 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度.

吸收系数 α 由下式给出,

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\pi \mu_0 c^2}{V \eta m^{*2} \omega} \sum_{ij} \int_{B.Z.} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{fi}|^2 [f_i(\mathbf{k}) - f_f(\mathbf{k})] \\ &\quad \times \delta(E_f(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \frac{2V}{(2\pi)^3} d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (10)$$

其中跃迁矩阵元

$$\mathbf{p}_{fi} = \langle \psi_f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) | \mathbf{p} | \psi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle, \quad (11)$$

\mathbf{p} 为动量算符, η 为折射率, \mathbf{e} 为电偏振单位矢量, $\hbar\omega$ 为光子能量, μ_0 为真空磁导率, c 为光速. 设入射光沿 x 方向, 电偏振方向沿 Z 方向, 则

$$|\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{fi}| = \langle \psi_f | p_z | \psi_i \rangle = \sum_m \hbar \left(k_x + m \frac{2\pi}{L} \right) C_m^i C_m^{f*} \quad (12)$$

把(12)式代入(10)式, 对 $k_{||}$ 积分, 得

$$\alpha = \frac{\mu_0 c e^2 k T}{2\pi \eta m^* \hbar^2 \omega} \sum_{if} \left| \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} \sum_m \hbar \left(k_x + m \frac{2\pi}{L} \right) C_m^i C_m^{f*} \right|^2 \times \ln \frac{1 + \exp((E_F - \epsilon_i(k_x))/kT)}{1 + \exp((E_F - \epsilon_f(k_x))/kT)} \delta(\epsilon_f(k_x) - \epsilon_i(k_x) - \hbar\omega) dk_x \quad (13)$$

在计算中把 $\delta(x)$ 写成洛伦兹函数

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{x^2 + \Gamma^2} \quad (14)$$

Γ 为洛伦兹展宽半宽。

3 结果和讨论

计算中取 GaAs 的禁带宽度 $E_g(\text{GaAs}) = 1.519\text{eV}$, Al_xGa_{1-x}As 的禁带宽度为 $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = E_g(\text{GaAs}) + 1.247x$. 对 $x = 0.4$, 假定导带和价带不连续性比值为 60/40, 则导带势垒高度 $V_c = 299\text{meV}$. 取 $m^* = 0.067m_0$, $\eta = 3.5$, $T = 300\text{K}$, $n = 1.5 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$, $\Gamma = 6\text{meV}$, $d = 150\text{\AA}$. 我们计算了阱宽为 30\AA 和 60\AA 两种情况的吸收谱. 图 1 是阱宽 $l = 30\text{\AA}$, 阱中只有一个基态的第一种情况. 可见基态到激发态的吸收 1-2, 1-3, 1-4 在同一量级. 图 2 是阱宽 $l = 60\text{\AA}$, 阱中存在一个基态和一个激发态的第二种情况. 可见吸收主要发生在阱中的两个束缚态之间, 而基态到第二激发态和到第三激发态的吸收 1-3 和 1-4 很弱.

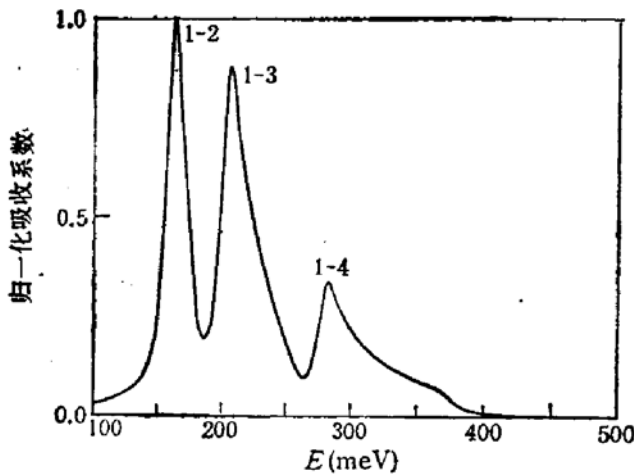


图 1 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱的光吸收谱
阱宽 $l = 30\text{\AA}$ 垒宽 $d = 150\text{\AA}$ 阱中掺杂浓度
 $n = 1.5 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 温度 $T = 300\text{K}$

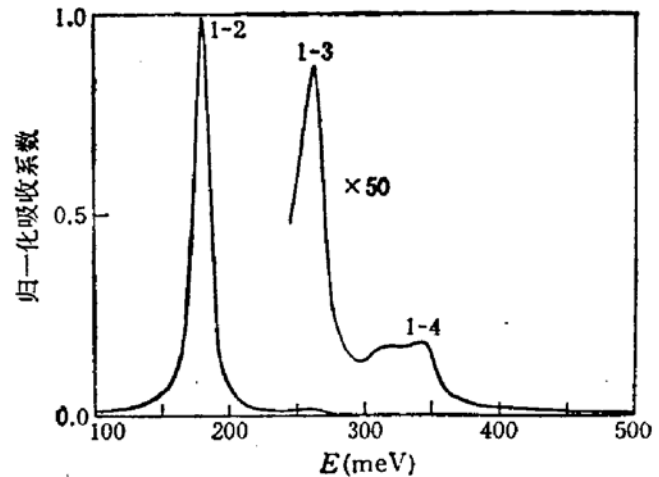


图 2 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱的光吸收谱
阱宽 $l = 60\text{\AA}$ 垒宽 $d = 150\text{\AA}$ 阱中掺杂浓度
 $n = 1.5 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 温度 $T = 300\text{K}$

图 1、图 2 给出的是归一化吸收系数, 图 1 中归一化常数 $C_1 = 0.296 \times 10^4\text{cm}^{-1}$, 图 2 的归一化常数为 $C_2 = 1.556 \times 10^4\text{cm}^{-1}$. 图 2 比图 1 的吸收系数大 $\frac{C_2}{C_1} = 5.26$ 倍. 造成两种情况下吸收谱不同的原因是束缚态(指阱中能级)的波函数基本局域在量子阱中, 而扩展态(指高于势垒的能级)的波函数不局域一个阱中而是扩展到多量子阱. 这样束缚态到束缚态的波函数交叠比束缚态到扩展态的波函数交叠要大, 因此束缚态到束缚态的

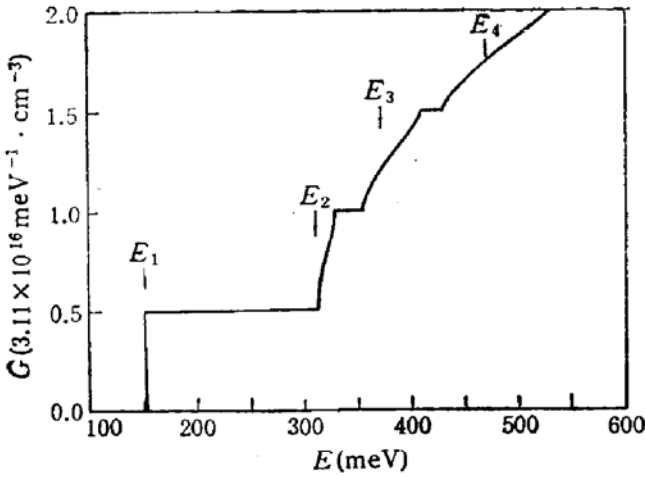


图3 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱的电子态密度
阱宽 $l = 30 \text{ \AA}$ 垒宽 $d = 150 \text{ \AA}$

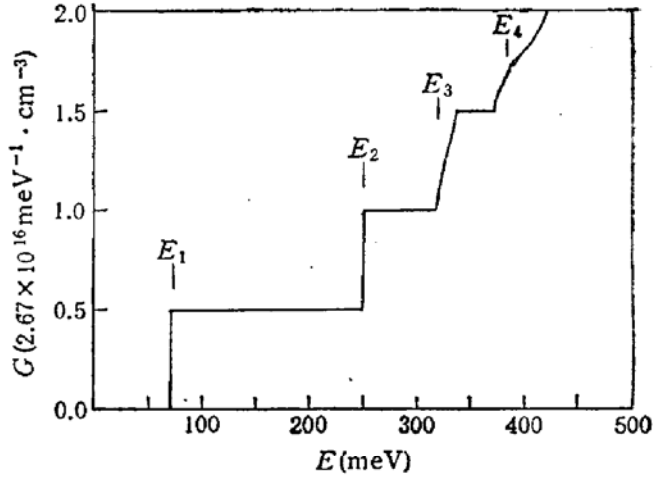


图4 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱的电子态密度
阱宽 $l = 60 \text{ \AA}$ 垒宽 $d = 150 \text{ \AA}$

跃迁矩阵元比束缚态到扩展态的跃迁矩阵元要大。

为了说明上述两种情况,我们计算了电子态密度,见图3和图4。从图3可见,阱中

只有一个基态 E_1 , 其色散很小, 而激发态 E_2, E_3, E_4 都位于势垒以上, 形成扩展态, 其色散较大。由图4可见, 量子阱中有两个束缚态, 一个是基态 E_1 , 一个是第一激发态 E_2 , 这两个能级的色散很小, 而激发态 E_3, E_4 高于势垒, 是扩展态, 其色散较大。

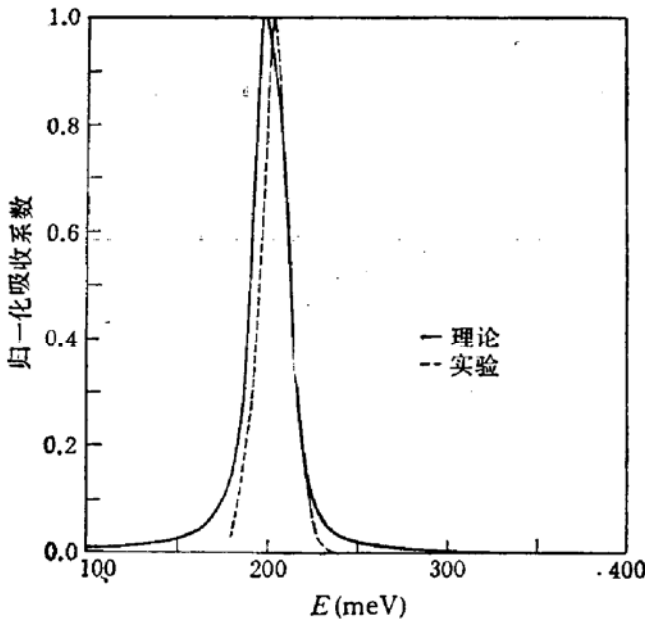


图5 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱吸收曲线
 $l = 45 \text{ \AA}$ $d = 150 \text{ \AA}$ $n = 1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ $T = 300 \text{ K}$

目前多量子阱红外探测器的设计普遍采用第一种情况, 即阱中只有一个基态能级。因为第一种情况的吸收系数虽然较小, 但是在工作电压下, 第一种情况的电子吸收光子由基态跃迁到激发态后, 不需要隧穿, 就可以形成光电流。因此第一种情况比第二种情况的光电流较大。

最后我们还计算了 $l = 45 \text{ \AA}$, 其它参数不变的 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱的吸收曲线, 并同实验曲线^[22]比较, 见图5。归一化系数为 $0.6979 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 。

4 结论

1. 在有效质量理论上计算了 GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As 多量子阱两种情况的吸收系数以及电子态密度。
2. 从计算结果看, 束缚态到束缚态的吸收比束缚态到扩展态的吸收强, 但从设计量子

阱探测器要求光电流大的角度看,应采用阱中只有一个基态能级的结构,以获得较大光电流。

参 考 文 献

- [1] R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. A. Nordland, Jr. and A. C. Gossard, *Phys. Rev.*, 1980, **B22**:863.
- [2] C. Weisbuch, R. C. Miller, R. Dingle, A. C. Gossard and W. Wiegman, *Solid State Commun.*, 1980, **37**:219.
- [3] Yia-Chung Chang and J. N. Schulman, *Phys. Rev.*, 1985, **B31**: 2069.
- [4] R. Eppenga, M. F. H. Schuurmans and S. Colak, *Phys. Rev.*, 1987, **B36**:1554.
- [5] L. C. West and S. J. Eglash, *Appl. Phys. Lett.*, **46**:1985, 1156.
- [6] B. F. Levine, G. G. Bethea, G. Hasnain, J. Walker and R. J. Malik, *Appl. Phys. Lett.*, 1988, **53**:296.
- [7] M. J. Kane, M. T. Emery, N. Apsley, C. R. Whitehouse and D. Lee, *Superlattices and Microstructures*, 1988, **5**:587.
- [8] K.-K. Choi, B. F. Levine, C. G. Bethea, J. Walker and R. J. Malik, *Appl. Phys. Lett.*, 1987, **50**:1814.
- [9] W. S. Houbson, A. Zussman, B. F. Levine, J. deJong, M. Geva and L. C. Luther, *J. Appl. Phys.*, 1992, **71**:3642.
- [10] K.-K. Choi, L. Fotiadis, M. Taysing-Lara, W. Chang and G. J. Lafrate, *Appl. Phys. Lett.*, 1992, **60**:592.
- [11] S. Nojima, *Phys. Rev.*, 1990, **B41**:10214.
- [12] B. F. Levine, A. Y. Cho, J. Walker, R. J. Mailk, D. A. Kleinman and D. L. Sivco, *Appl. Phys. Lett.*, 1988, **52**:148.

Calculation of Intersubband Optical Absorption in GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As Multiquantum Well Infrared Detector

Fan Weijun and Xia Jianbai

*(National Laboratory of Superlattice and Microstructure Institute of Semiconductors,
The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)*

Abstract The intersubband (in the conduction band) optical absorption coefficients and the densities of states in GaAs/Al_{0.4}Ga_{0.6}As multiquantum wells are calculated by using the effective mass theory for two cases. The first case is that there is one ground state in quantum well; the second case is that there are one ground state and one excited state in quantum well. The calculated curves are compared with the experimental results.

PACC: 7360F, 7865.