

# GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 量子阱能级结构设计 与光谱分析\*

李 娜 袁先漳 李 宁 陆 卫 李志峰 窦红飞 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)

金 莉 李宏伟 周均铭 黄 绮

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(1999 年 6 月 28 日收到)

通过理论计算对用于量子阱红外探测器的 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 量子阱能级结构进行模拟设计, 将不同生长结构的量子阱材料的光响应谱和光致荧光谱(PL)与计算结果进行比较, 说明量子阱生长结构与量子阱能级结构的关系. 欲使量子阱红外探测器的响应峰值在 8 μm 附近, 则需量子阱结构中阱宽为 4.7 nm, 垒中 Al 含量为 0.29. 理论计算与测试结果符合得较好.

PACC: 7240; 7865

## 1 引 言

在过去近十年中, 量子阱红外探测器(quantum well infrared photodetector 缩写为 QWIP)得到快速的发展<sup>[1]</sup>, 这是因为与 HgCdTe 光电二极管相比, 在 GaAs/AlGaAs 量子阱材料和器件制作工艺方面有许多明显的优点, 诸如材料大面积均匀, 成品率高等. 红外焦平面探测器<sup>[2]</sup>的研制成功, 说明量子阱红外探测器在用于长波及多色探测方面具有极大的潜能. 国内于 90 年代初开始量子阱材料物理及器件物理的研究, 中国科学院物理研究所和上海技术物理研究所在量子阱材料生长和阵列器件制作方面取得了良好的成绩, 研制成功了 128 × 1 线列<sup>[3]</sup>和 64 × 64 GaAs/AlGaAs 量子阱红外焦平面器件<sup>[4]</sup>. 在研制过程中对材料结构进行了优化设计, 不仅要提高材料性能、降低噪声, 而且要使探测波长进入 8—10 μm 这一重要的大气窗口. 但探测器基本特性如响应率和暗电流等与制作工艺有较为密切的关系, 而探测器响应光谱特性则基本反映了量子阱结构和能级水平. 本文将以理论分析为基础, 结合光电流谱的测试结果, 说明量子阱结构特别是阱宽、垒高与探测峰值波长的关系.

## 2 理论概述

### 2.1 量子阱探测器三种光激发跃迁形式

GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器是利用掺杂量子阱的导带中形成的子带间跃迁, 并将从基态激发到第一激发态的电子通过电场作用形成光电流这一物理过程, 实现对红外辐射的探测. 对于 n<sup>+</sup> 型 QWIP, 导带势阱中至少包含一个子带作为光致激发电子的基态, 基态电子由 GaAs 势阱中的掺杂硅提供. 根据激发态的位置, 可分为三种跃迁形式: 其一为束缚态到连续态, 称为 b—c QWIP, 被激发的载流子直接进入势垒上的连续态中, 被外电场加速, 或直接到达电极层, 或被其他量子阱俘获, 这种 QWIP 有较宽的光谱响应和较大的暗电流. 其二为束缚态到束缚态, 称为 b—b QWIP, 即激发态在势阱中, 红外辐射激发载流子的能量完全等于子带间距能量, 载流子必须隧穿通过势垒到达导带的连续态, 因此需要较大的外加偏压, 并有较窄光谱响应线宽. 第三种为束缚态到准束缚态的跃迁, 称为 b—qb QWIP, 这种 QWIP 的激发态被设计在势垒的边缘, 具有上述两种结构的优点, 载流子无需隧穿即可贡

\* 973 项目《光电功能晶体结构性能、分子设计、微结构设计与制备过程的研究》资助的课题.

献于光电流,在较宽的势垒的限制下,可降低暗电流.因此我们采用第三种跃迁形式的 QWIP 结构,并对这种结构和器件进行较为系统的研究.

所设计的量子阱结构,应使从基态被激发到激发态的载流子能从势阱中逸出并且被收集为光电流.根据探测波段的需求,确定合适的材料结构参量,主要包括 GaAs/AlGaAs 多量子阱中的阱宽、势垒高度和掺杂浓度,从而确定量子阱中的能级分布和光学吸收.有几种计算量子阱中能级结构和相应波函数的计算方法,即薛定谔方程不同解法<sup>[5,6]</sup>.除标准的解析分析方法外,有 WKB 近似法、K-P 模拟法和传输矩阵法. K-P 法最简单,但只能处理规则量子阱结构. WKB 法可以获得薛定谔方程的近似解析解,经常被用于分析不规则量子阱结构,但器件模拟不够准确,而且不能分析势垒上的输运情况.传输矩阵法是最有效的方法,既可用于能级计算也可获得波函数.因此常采用此方法进行量子阱结构优化设计和模拟.

## 2.2 量子阱子带能级计算

量子阱红外探测器的探测峰值波长由下式表示:

$$\lambda_p = \frac{hc}{(E_2 - E_1)}, \quad (1)$$

其中  $h$  为普朗克常量,  $c$  为光速,  $E_1$  和  $E_2$  分别为量子阱中相对于势阱底边的第一和第二子能级.基态能级  $E_1$  可由传输矩阵法计算得出,在此不再赘述.激发态  $E_2$  可用简单的解析方法获得.

虽然标准的解析方法不能有效地解薛定谔方程,但针对简单条件可给出确定的解.如量子阱由两层  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  势垒中间夹 GaAs 势阱层组成,  $x$  是势垒中 Al 的摩尔含量.对于能谷  $\Gamma$  可以假定势垒高度  $H$  与  $\Delta E_c$  相等,即  $H = \Delta E_c = 0.6\Delta E_g = 748x$  (meV).每一层的有效电子质量  $m^* = (0.067 + 0.083x)m_0$ ,其中自由空间电子质量为  $m_0 = 9.11 \times 10^{-31}$  kg.对于这样的结构,薛定谔方程如下式:

$$H_0 \Psi = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m^*(x)} \frac{d}{dx} + V(x) \right\} \Psi = E \Psi, \quad (2)$$

其中  $V(x)$  是势垒势能.对于(1)式相应的边界条件是  $\Psi$  和  $(1/m^*)d\Psi/dx$  在边界处连续.定义  $\Psi$  在第一个 AlGaAs 层、GaAs 势垒层以及第二个 AlGaAs 层中分别为  $\Psi_1$ ,  $\Psi_2$  和  $\Psi_3$ ,这些波函数的解可以有如下形式:

$$\Psi_1(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \quad (3)$$

$$\Psi_2(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}, \quad (4)$$

$$\Psi_3(x) = F e^{ik_1 x}, \quad (5)$$

其中  $k_1 = (2m_1^* E)^{1/2}/\hbar$ ,  $k_2 = [2m_2^* H]^{1/2}/\hbar$ ,  $E$  是 GaAs 导带边缘的电子能级.根据选择定则  $k_2 W = \pi$ ,对于束缚态到准束缚态的跃迁形式,可假设势垒高度  $H$  等于激发态能级  $E_1$ ,故有如下的关系式:

$$\frac{\sqrt{2m^* E_2} W}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m^* H} W}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m^* 748x} W}{\hbar} = \pi. \quad (6)$$

因此确定激发态位置与量子阱结构参量的关系,并进一步确定  $\lambda_p$ .图 1 反映了量子阱宽度、Al 含量  $x$  与  $E_1$ ,  $E_2$  和探测峰值波长  $\lambda_p$  的关系.如图 1 所示,调整 Al 含量  $x$  可对  $E_2$  有较大的影响,而变化阱宽  $W$  则  $E_1$  相对于  $E_2$  会有较大的变化.

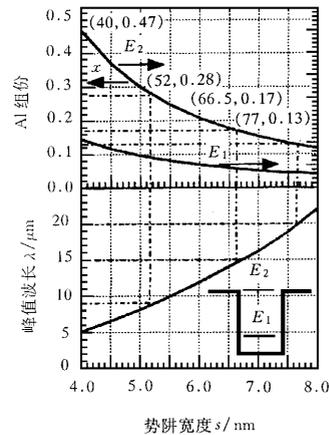


图 1 量子阱结构参量与探测峰值波长的关系

## 3 光响应谱测试

测试样品的量子阱结构由 50 个周期的约 5 nm 阱和 50 nm 垒组成,其中阱中掺杂为  $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,垒中 Al 含量在 0.3 附近.量子阱的上下覆盖层为掺杂  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  Si,厚度为  $1 \mu\text{m}$  的  $n^+$ -GaAs 电极层.将分子束外延 (MBE) 生长出的 GaAs/AlGaAs 量子阱材料,用湿法刻蚀出面积为  $250 \mu\text{m} \times 250 \mu\text{m}$  台面,以 AuGeNi/Au 层作上下电极的欧姆接触层,制成单元红外探测器器件.在台面制作工艺前刻蚀出光栅结构或侧面  $45^\circ$  抛光以实现光学耦合,用金丝球焊引出电极引线后,装入 77 K 液氮制冷杜瓦瓶.

将杜瓦瓶放入傅里叶光谱仪的样品室中,给器件加偏压.用前置放大器放大光电流信号并传输到光谱仪的数据处理系统,选择适当的测试参量进行测量,得到器件的光响应谱,测试示意如图 2,测试结果如表 1 和图 3.

表 1 列出了实验过程中所采用的样品的量子阱

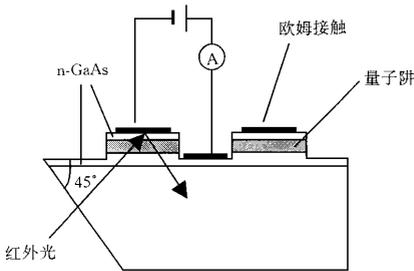


图 2 单元量子阱红外探测器器件及测试示意图

结构、测试和理论计算结果.由这些类似结构的光响应谱(图 3(a)和(b))可看出,当阱宽在 4.5—5.0 nm 范围内,Al 含量在 0.27—0.32 范围内,响应峰值波长在 7.8—8.4  $\mu\text{m}$  内变化.结合图 1,可说明当 Al 含量  $x$  减小时,峰值响应波长  $\lambda_p$  向长波方向移动,这主要是由于激发态  $E_2$  随势垒高度的降低而下降,同时使量子阱中的子带间距逐渐缩小.图 3(b)则反映出当势阱变窄时,基态  $E_1$  相对于势阱底而上升,同样使子带间距缩小,峰值波长红移.在峰值波长红移的过程中,响应光谱的半高宽也逐渐增加, $\Delta\lambda_p/\lambda_p$  从 10% 上升至 20%,说明激发态  $E_2$  逐渐从势阱口内向势阱口外移动,即光激发载流子跃迁形式从束缚态到准束缚态向束缚态到连续态跃迁方式转变.表 1 中第一个样品和最后一个样品的测试值与理论计算值有较大的差异,是因为这些样品的跃迁方式更接近后者.

表 1 量子阱结构与响应峰值波长对照表

样品号	量子阱结构		测试结果			理论计算结果
	阱宽/nm	Al 含量 $x$	$\lambda_p/\mu\text{m}$	$\Delta\lambda_p/\mu\text{m}$	$(E_2 - E_1)/\text{meV}$	$(E_2 - E_1)/\text{meV}$
A	5.0	0.27	8.44	1.2	146.9	131.9
B	5.0	0.29	8.28	0.9	149.8	146.9
C	5.0	0.30	7.79	0.8	159.2	154.4
D	4.7	0.30	8.04	1.3	154.2	148.8
E	4.5	0.30	8.41	1.6	147.4	139.1

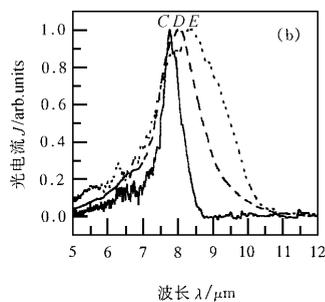
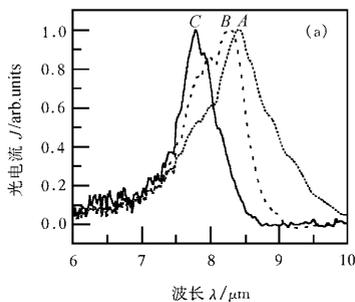


图 3 GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器响应光谱随量子阱结构的变化 (a)为响应光谱随 Al 含量的变化 (b)为响应光谱随阱宽的变化

## 4 光致荧光光谱

光致荧光光谱是确定带间跃迁能量的一般方法,峰值波长反映了量子阱材料中电子与轻重空穴之间的能量间距情况.为了进行光致荧光光谱测试,

腐蚀样品的上电极层后,以氦氖激光器作为激发源,用硅电荷耦合器件(CCD)作探测,室温测试结果如图 4.

图 4 中每条曲线的两个峰分别对应价带中轻重空穴的禁带跃迁.由表 2 详细数据可见当增加势阱宽度,或减少势垒中 Al 含量时,量子阱区的带间跃

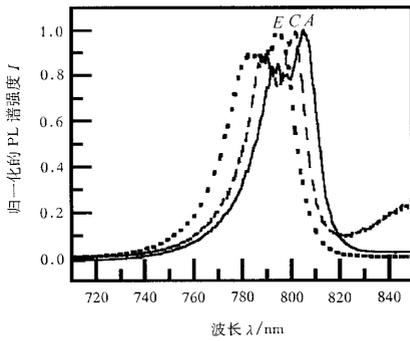


图 4 不同量子阱结构的 PL 谱

迁能量降低,这一趋势与理论计算相符合.表 1 与表 2 的实验结果显示, A 与 C, E 与 C 样品间的子带间跃迁能量差分别为 12.3 和 11.6 meV, 而带间跃迁能量差分别为 22 和 12 meV, 说明减少势垒中的 Al 含量, 在降低势垒区禁带宽度的同时, 使势阱区的禁带宽度降低. 另外, 改变势阱宽度引起的带间跃迁能量的变化, 主要来源于导带阱中电子基态能级的变化, 禁带宽度以及空穴基态能级的变化很小.

## 5 结 论

通过上述对 GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器光响应谱及量子阱材料的 PL 谱的讨论以及理论分析, 说明了束缚态至准束缚态量子阱结构与响应波长的关系, 并获得一个较为清晰的量子阱生长结构与量子阱能级结构的变化关系. 结果表明, 欲使量子

表 2 PL 谱测试结果与理论计算结果的比较

样品号	实验结果		理论计算	
	$\Delta E_{e-hh}/\text{eV}$	$\Delta E_{e-hh}/\text{eV}$	$\Delta E_{e-hh}/\text{eV}$	$\Delta E_{e-hh}/\text{eV}$
A	1.561	1.539	1.549	1.526
C	1.572	1.547	1.564	1.530
E	1.583	1.561	1.573	1.552

阱红外探测器的响应峰值波长在  $8\ \mu\text{m}$  附近, 量子阱结构中阱宽需在 4.5—5.0 nm 之间, 势垒中 Al 含量应在 0.3—0.27 范围内.

理论计算与测试结果的差异, 一方面来自材料生长的精确控制程度和生长方向上各界面中会有层厚无序涨落; 另一方面是由于理论计算中的近似条件. 在计算过程中, 将 GaAs 和 AlGaAs 两种材料的导带底在界面处所形成的突变值, 即带阶 (band offset) 取值为  $\Delta E_c = 0.6\Delta E_g$ , 而目前还没有很精确的实际值测试结果<sup>[6]</sup>. 总之上述的理论分析和实验结果为量子阱红外探测器结构的优化和性能的改善奠定了坚实的基础, 并为长波和多色探测器的研制提供了条件.

在此感谢国防预项目和攀登计划的大力资助, 感谢中国科学院物理研究所为本研究提供材料样品.

- [1] B. F. Levine *J. Appl. Phys.* **74**(1993) R1.  
 [2] S. D. Gunapala, J. K. Liu, J. S. Park *et al.*, *IEEE Trans. Electron Devices* **44**(1997) 51.  
 [3] M. F. Wan, H. J. Ou, W. Lu *et al.*, *J. Infr. Millim. Waves* **17**(1998) 74 [in Chinese] 万明芳、欧海疆、陆卫等, 红外与毫米波学报, **17**(1998) 74.  
 [4] N. Li, N. Li, W. Lu *et al.*, *J. Infr. Millim. Waves* **18**(1998) 230 [in Chinese] 李宁、李娜、陆卫, 红外与毫

米波学报, **18**(1999) 230.]

- [5] K. K. Choi, *The Physics of Quantum Well Infrared Photodetector* (World Scientific, 1997) p. 26.  
 [6] J. B. Xia, B. F. Zhu, *Semiconductor Superlattice Physics* (Shanghai Science and Technology Press, Shanghai, 1994), p. 33 [in Chinese] 夏建白、朱邦芬, 半导体超晶格物理(上海科学技术出版社, 上海, 1994) 第 33 页.]

## DESIGN AND MEASUREMENT OF GaAs/AlGaAs QUANTUM WELL STRUCTURE

LI NA YUAN XIAN-ZHANG LI NING LU WEI LI ZHI-FENG DOU HONG-FEI SHEN XUE-CHU

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

JIN LI LI HONG-WEI ZHOU JUN-MING HUANG YI

( *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China* )

( Received 28 June 1999 )

### ABSTRACT

In this paper, we describe the energy levels of GaAs/AlGaAs quantum well structure used in quantum well Infrared photodetector (QWIP). The photoresponse and photoluminescent spectrum of quantum well material were measured. The experiment and simulation show that the width of the well and the Al molar ratio of QWIP should be 4.7nm and 0.29, separately, if the peak wavelength of QWIP is expected to be at 8  $\mu\text{m}$ .

PACC : 7240 ; 7865