

可用于红外探测器的自组织量子线及其带间 和子带间光学跃迁*

李良新[†] 胡勇华

(湖南大学应用物理系,长沙 410082)

(2004 年 1 月 7 日收到,2004 年 4 月 27 日收到修改稿)

研究了自组织量子线 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ 的结构、应力分布及其光学性质.模拟了微应力导致的横向成序及其导引短周期超晶格形成量子线的过程,并计算出量子线在原子尺度上的微应力分布.这里考虑了价带各向异性、带间混合及局域应力分布对光学性质的作用.研究发现自组织量子线具有应用于正入射红外探测器的良好光学特性.结果显示当量子线的周期长度为 15 到 30nm 时,导带子带间跃迁波长处在 10 到 20 μm ,这正是红外探测器的理想工作范围.同时,带间吸收波长在中红外范围,它提供了红外探测器的另一个窗口.

关键词:自组织,微应力,红外探测器,量子线

PACC:7000,7115F,7320D

1. 引言

近年来,实验和理论上已经对量子阱红外光电探测器(QWIPs)进行了广泛的研究^[1-5].在 QWIPs 中使用的主要机理是子带间光学跃迁,这是因为在典型的 III-V 量子阱中可以选择这些跃迁的波长来适应红外探测的操作波长的需要.由于它的窄带吸收,QWIPs 是对传统的 HgCdTe 探测器的补充,HgCdTe 探测器利用带间跃迁,从而只适用于宽带吸收.基于 III-V 原子的半导体量子阱的 QWIPs 已经普遍被认为是用于制造平面高密度红外(IR)成像阵和期望中的 IR 探测器的候选者^[2].QWIPs 的主要缺点是缺乏正入射探测能力,除非进行一些处理以在表面上制成衍射光栅,但这样就减弱了该物质对入射光的响应^[2].因为量子阱中的电子在垂直生长轴的平面里有平移不变性(在有效质量模型中),电子对于正入射的子带跃迁强度是 \propto (即使可能与其他带相耦合,跃迁也非常小).破坏平移不变性的一个方法是利用在许多现今制造的 QWIPs 中所普遍采用的表面折射光栅.一个破坏平面内平移不变性的更好的(也较便宜的)办法是利用构成自组织的纳米结构的物质

的应变引起的横向调制.这些纳米结构包括量子线(QWR)^[6-18]和量子点^[19-23].因为横向调制是通过自组织来形成的,一旦最优化生长参数知道了,对这类物质的制造方法将会更有效.因此,将它们用于器件制备会花费更少.

由应变引起的横向成序(SILO)过程生长的自组织的 III-V QWR 近来吸引了很大的注意力^[12-18].自组织过程发生在短周期超晶格(SPS)在 InP 基层上沿 [001] 方向生长的过程中.过剩的部分 InAs 层在初始的分子束外延(MBE)生长中导致了条纹岛状物的产生^[12].当额外 GaAs 或 InAs 层沉积其上,条纹的存在与应力结合起来就导致自然的相分离,因而其结构 In/Ga 成分就变成横向调制的了.这样,就可以在势垒物质如 $\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.24}\text{In}_{0.25}\text{As}$ (四元的), $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ 或 InP(二元的)之间加一个调制层来制造一个自组织的 QWR 异质结构^[12-18].

实验已经发现不同的势垒物质能导致不同的横向合金调制.根据生长时间和温度的不同,可以形成周期为 10—30nm 的横向调制^[24].

本文探讨 IR 探测器中由 SILO 过程生长的 InGaAs QWR 的用处.理论模型包括了真实的带结构和微观应变分布的效应.这可以通过将有效键轨道

* 湖南大学优秀人才基金资助的课题.

[†]E-mail: hongleee@sina.com

模型(EBOM)^[25]和价场模型(VFF)^[26-28]相结合来研究 IR 探测器的一个主要参数是量子吸收能力. 它通过 $\eta = 1 - e^{-\alpha l}$ 与吸收系数直接相关(这里 α 是吸收系数, l 是样品长度)^[29]. 因此,为了适于器件应用的材料一个客观的评定,需要对吸收系数进行详细计算,并同时考虑激子和带结构的效应. 本文对一系列结构参数的带间和子带间跃迁进行了系统研究,通过选择这些参数以达到最佳 IR 探测效果.

研究发现 InGaAs 自组织 QWR 的子带间跃迁波长范围在 10—20 μm 之间,而带间跃迁波长比 1.5 μm 还要小. 因此,该物质结构在两个不同的波长处同时提供 IR 探测,这正是多色 IR 视频摄像机应用所需要的.

这里考虑了几个横向合金调制混合程度不同的结构模型. 对于这些结构的带间吸收,激子效应很重要,因为它使跃迁峰值能量位置偏移,并使吸收谱强

度增大. 为了研究激子在离散谱和连续谱上的效应,本文用从 k 空间网格取样的一大组本征函数基的方法直接将激子哈密顿量对角化. 研究的重点放在各种峰值谱线结构的形状的分析上. 这些谱线结构由一对子带的离散激子态与其他子带的激子态(离散的或连续的)相耦合而产生. 我们发现激子效应使第一个吸收峰增强 1.2—1.5 倍,并使峰值位置改变约 20—50meV.

2. 理论模型

这里考虑的 QWR 结构由八对夹在 $\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.24}\text{In}_{0.25}\text{As}$ 势垒间的 $(\text{GaAs})_2(\text{InAs})_{2.25}$ SPS 构成. 因为横向成序,结构模型就由 SPS 结构中具有分数 In 或 Ga 单层的合金混合物的周期调制而形成. 若以底层为第一层,在第七和第九层中,有

$$x_{\text{In}} = \begin{cases} x_m [1 - \sin(\pi y' / 2b)] / 2 & (y' < b), \\ 0 & (b < y' < L/2 - b), \\ x_m \{1 + \sin[\pi(y' - L) / 2b]\} / 2 & (L/2 - b < y' < L/2 + b), \\ x_m & (L/2 + b < y' < L - b), \\ x_m \{1 - \sin[\pi(y' - L) / 2b]\} / 2 & (y' > L - b), \end{cases} \quad (1)$$

这里 x_{In} 是合金 GaInAs 层中 In 含量, x_m 是层中 In 含量的最大值, $2b$ 表示横向阶梯的宽度, L 是 $[110]$ 方向横向调制的周期,其大小由生长时间和温度来

控制. 实验可行的 L 值为 10nm—30nm.

在第三和第十三层中,有

$$x_{\text{In}} = \begin{cases} 0 & (0 < y' < 5L/8 - b), \\ x_m \{1 + \sin[\pi(y' - 5L/8) / 2b]\} / 2 & (5L/8 - b < y' < 5L/8 + b), \\ x_m & (5L/8 + b < y' < 7L/8 - b), \\ x_m \{1 - \sin[\pi(y' - 5L/8) / 2b]\} / 2 & (7L/8 - b < y' < 7L/8 + b), \\ 0 & (7L/8 + b < y' < L). \end{cases} \quad (2)$$

第五和第十一层的 x_{Ga} 的相似的方程可以由上式推得. 通过改变 x_m 和 b , 可以得到不同程度的横向合金混合. 典型的 x_m 为 0.6—1.0, b 在 0—15 $a_{[110]} \approx 6.2\text{nm}$ 之间.

VFF 模型^[26-28]用来通过极小化晶格能量以找到自组织 QWR 中原子的平衡位置. 通过计算化学键的局部畸变可得到每一个 In 或 Ga 原子位置的应变张量. 一旦结构模型中的微观应变分布被确定(在

图 2 中显示四层典型的微应力分布),自组织量子线的能级和波函数就可在 EBOM 中算出. 文献[25,30—34]对这种方法有详细描述. 这里所用的 EBOM 是一个类紧束缚模型. 其内部有两个类 s 导带(包括自旋)和 4 个总角动量为 $J = 3/2$ 的价带(由于自旋轨道耦合). 因此,当前模型可与六带 $k \cdot p$ 模型相比较. 为使计算量降到最小,我们根据一个量子阱结构平面内的不同波矢量本征态来表示 QWR 结

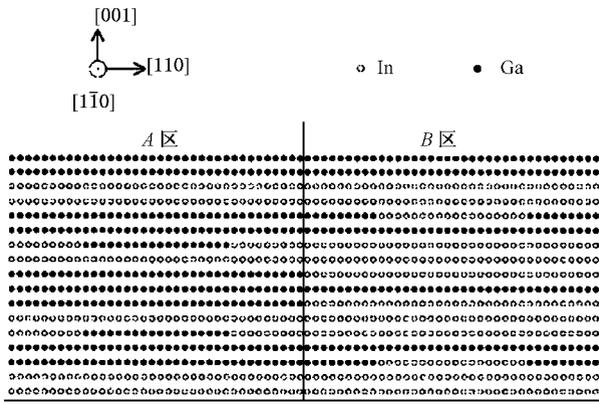


图 1 本文研究的自组织量子线的元胞模型示意图. 每一个元胞包含 8 对 (2/2.25) 短周期超晶格 (SPS) + 4 对 (2/2.25) SPS 形成一个周期, 元胞里该周期被重复两次. 黑点和白圈分别表示 Ga 与 In 排列 (每一排沿 [1-10] 方向无限延伸)

构的电子或空穴态. 此量子阱由 8 对 (GaAs)₂(InAs)₂ SPS 和两个 InAs 单层 (一个插在第二对 SPS 后, 另一个插在第六对 SPS 后) 所组成, 所以总的 In/Ga 成分比与 (GaAs)₂(InAs)_{2.25} SPS 的一样. 然后将整块 SPS 夹在两厚块 Al_{0.24}Gn_{0.24}In_{0.25} 垒之间. 把量子阱的本征态记为 $|n, k_1, k_2\rangle_{\text{QWR}}$. 这里 n 标示子带, k_1 标示沿线 ([1-10]) 方向的波矢, k_2 标示沿 [110] 方向的波矢, 它与线及生长轴垂直. 根据键轨道来展开量子阱的态, 有

$$|n, k_1, k_2\rangle_{\text{QWR}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha, \mathbf{R}} f_{n, k_1, k_2}(\alpha, \mathbf{R}_z) \times \exp(ik_2 R_z) \exp(ik_1 R_1) |u_{\alpha}(\mathbf{R})\rangle,$$

式中 N 是归一化常数, $f_{n, k_1, k_2}(\alpha, \mathbf{R}_z)$ 是量子阱哈密顿量的本征矢量, $|u_{\alpha}(\mathbf{R})\rangle$ 标示一个 \mathbf{R} 处类 α 键轨道 ($\alpha = 1, 2, \dots, 6$ 对应于两个 s 导态, 4 个 $J = 3/2$ 的价带轨道函数). 这里 \mathbf{R} 遍历在 SPS 层 (阱区) 和 AlGaInAs 层 (垒区) 中的所有晶格位置.

然后我们在一个适当的基将 QWR 的哈密顿量对角化. 这个基由在 k_2 上相隔一个倒易格矢量 $g_m = m(2\pi/a_{[110]})$ 的量子阱态组成, m 为整数. 这样, QWR 态写为

$$|i, k_1, k_2\rangle = \sum_{n, m} C_{i, k_1}(n, k_2 + g_m) |n, k_1, k_2 + g_m\rangle_{\text{QWR}},$$

其中 $C_{i, k_1}(n, k_2 + g_m)$ 是波矢量为 (k_1, k_2) QWR 哈密顿量矩阵的第 i 个本征矢. 根据键轨道函数, 将 QWR 态定为

$$|i, k_1, k_2\rangle = \sum_{\alpha, \mathbf{R}} F_{i, k_1, k_2}(\alpha, \mathbf{R}) |u_{\alpha}(\mathbf{R})\rangle,$$

这里

$$F_{i, k_1, k_2}(\alpha, \mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n, m} C_{i, k_1}(n, k_2 + g_m) \times f_{n, k_1, k_2 + g_m}(\alpha, \mathbf{R}_z) \exp[i(k_2 + g_m)R_z] \times \exp(ik_1 R_1)$$

是 QWR 态的包络函数. 对于横向限制了的状态, 相对 k_2 的带色散可以忽略. 从而, 对 k_2 的依赖性可以忽略.

子带 i 和 j 间的跃迁吸收系数由

$$\alpha_{i, j}(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{n_r m_e^2 c L_z \hbar\omega} \sum_{k_1, k_2} | \langle i, k_1, k_2 | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | j, k_1, k_2 \rangle |^2 \times [f_i(k_1, k_2) - f_j(k_1, k_2)] [E_j(k_1, k_2) - E_i(k_1, k_2) - \hbar\omega] \quad (3)$$

给出. 这里 n_r 是 QWR 的折射率, L_z 是 SPS 区 (或限在 z 方向的 QWR) 的宽, f_i (f_j) 是子带 i (j) 的 Fermi-Dirac 分布函数. QWR 子带态间的光学矩阵与键轨道函数的联系是

$$\langle i, k_1, k_2 | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | j, k_1, k_2 \rangle = \sum_{\alpha, \alpha', \mathbf{r}} F_{i, k_1, k_2}^*(\alpha, \mathbf{R}) F_{j, k_1, k_2}(\alpha', \mathbf{R}) u_{\alpha}(\mathbf{R}) \times | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | u_{\alpha'}(\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}),$$

$\boldsymbol{\tau}$ 遍历该点位置和 fcc 晶格中的 12 个最邻近位置. 键轨道函数间的光学矩阵元是通过要求近中心那些体态的光矩阵元与通过 $k \cdot p$ 理论^[35] 得到的体态矩阵元一致来与带参数相关联. 我们得到^[31]

$$u_s(\mathbf{R}) | p_{\alpha} u_{\alpha'}(\mathbf{R}) = \sqrt{m_0 E_p / 2} \delta_{\alpha, \alpha'} | \alpha = x, y, z, u_s(\mathbf{R}) | p_{\alpha} u_s(\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}) = (\hbar/2\sqrt{2}a) [E_p/E_g - m_0/m_e^*] \tau_{\alpha} | \alpha = x, y, z, \tau_{\alpha}$$

τ_{α} 是以 $a/2$ 为单位的 $\boldsymbol{\tau}$ 格矢中的第 α 分量, a 是体晶格常数, E_p 是文献[35]中定义的带间光学矩阵元, m_e^* 是电子有效质量.

图 2 列出了图 1 中所示的量子线结构的对角应变张量分布. 其应变的特征大小在 2% 到 6% 之间. 而且 $\epsilon_{x'x'}$ 总是和 $\epsilon_{y'y'}$, $\epsilon_{z'z'}$ 符号相反, 这样它们的和总是接近 0, 以使得总的体积变化接近于 0. 另一个特征是 $\epsilon_{y'y'}$ 和 $\epsilon_{z'z'}$ 之间的对称被破坏.

下面, 我们研究带间跃迁. 对带间跃迁, 激子效应对于不掺杂的样本来说很重要. 对于重掺杂的样本, 由于相空间填充和载流子的屏蔽效应, 激子效应可以忽略. 这里, 这两种情况都被考虑. 本文只对由横向禁闭引起的近带边缘态的吸收谱感兴趣. 因此, k_2 方向的散射可以不考虑. 没有激子效应的

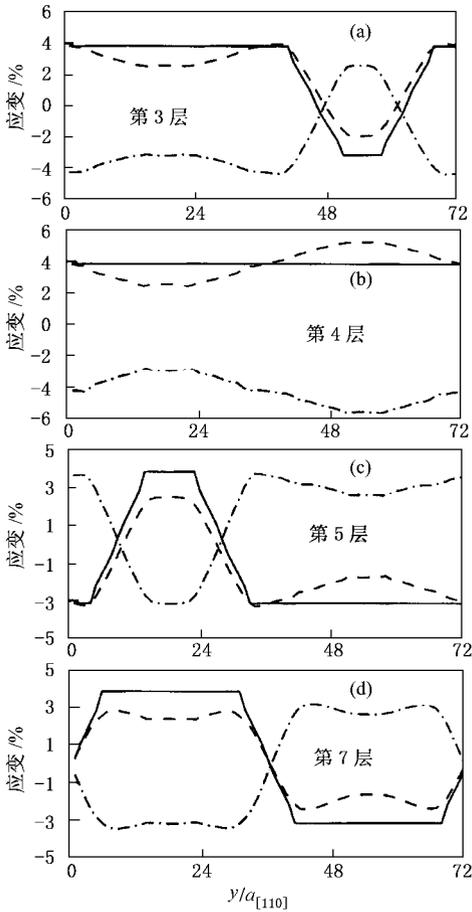


图2 图1中的结构的对角应变分布:实线为 ϵ_{xx} , 虚划线为 ϵ_{yy} , 点划线为 ϵ_{zz} . 合金混合参数: $x_m = 0.8$, $b = 7a_{[110]}$

情况下,吸收系数由方程(3)给出, $i(j)$ 表示子价(导)带态.在低温时,价带态全部被填充,所以方程(3)中的 Fermi-Dirac 分布(f_i)可以用1代替.对于未掺杂样本,在质量中心中,零动量的激子态被写成以相同 k_1 (波矢量沿线的方向)耦合的电子和空穴态的乘积的线性组合.我们把第 i 子导带态和第 j 子价带态的电子空穴乘积态写出为

$$|i j; k_1\rangle = |i; k_1\rangle |j; k_1\rangle = \sum_{\alpha \beta} F_{i, k_1}(\alpha, \mathbf{R}_e) G_{j, k_1}(\beta, \mathbf{R}_h) |u_\alpha(\mathbf{R}_e)\rangle |u_\beta(\mathbf{R}_h)\rangle.$$

这组激子基矢的 Hamiltonian 矩阵元由下式给出:

$$\begin{aligned} \langle i j; k_1 | H_{ex} | i' j'; k'_1 \rangle &= [E_i(k_1) - E_j(k_1)] \delta_{i, i'} \delta_{j, j'} \delta_{k_1, k'_1} \\ &- \sum_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h} \delta_{i, i'}^* \delta_{j, j'}(\mathbf{R}_e) v(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h) \\ &\times G_{j, j'}(k_1, k'_1; \mathbf{R}_h), \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h$ 是电子和空穴的位置矢量, $v(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h)$

$= 4\pi e^2 / \epsilon(0) | \mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h |$ 是被静电介电常数 $\epsilon(0)$ 屏蔽的电子和空穴之间的库仑相互作用.并且

$$\delta_{i, i'}^*(k_1, k'_1; \mathbf{R}_e) = \sum_{\alpha} F_{i, k_1}^*(\alpha, \mathbf{R}_e) F_{i', k'_1}(\alpha, \mathbf{R}_e)$$

描绘了电子的电荷密度矩阵.相似地

$$g_{j, j'}(k_1, k'_1; \mathbf{R}_h) = \sum_{\beta} G_{j, k_1}^*(\beta, \mathbf{R}_h) G_{j', k'_1}(\beta, \mathbf{R}_h)$$

描绘了空穴的电荷密度矩阵.在方程(4)中,采用了近似

$$\begin{aligned} u_\alpha(\mathbf{R}_e) |u_\beta(\mathbf{R}_h)\rangle |v\rangle |u_{\alpha'}(\mathbf{R}'_e) |u_{\beta'}(\mathbf{R}'_h)\rangle \\ \approx v(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h) \delta_{\alpha, \alpha'} \delta_{\beta, \beta'} \delta_{\mathbf{R}_e, \mathbf{R}'_e} \delta_{\mathbf{R}_h, \mathbf{R}'_h}, \end{aligned}$$

这是因为库仑电势在晶格常数距离内是一个连续函数(除在原点外),而且键轨道函数是互为正交的.在原点($\mathbf{R}_e = \mathbf{R}_h$),电势是奇异的,用一个经验常数来代替它.此常数已被调整以便和有效质量理论体系得出相同的激子束缚能量.因为激子的玻尔半径比晶格常数大得多,所以实际上结果都几乎不受在本位置上的库仑电势参数的影响.

对角化后,得到空穴-电子乘积态线性组合后的激子态.带间吸收系数由下式算得:

$$\begin{aligned} \alpha^{ex} &= \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{n_i m_e^2 c A \hbar \omega} \sum_n \left| \sum_{i, j, k_1} C_{ij}^n(k_1) \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_{ij}(k_1) \right|^2 \\ &\times \delta(\hbar \omega - E_n^{ex}), \end{aligned} \quad (5)$$

这里 A 是 QWR 元胞(图1所示)中 SPS 区的横截面积. $C_{ij}^n(k_1)$ 是通过对角化激子的哈密顿量((4)式)所得的第 n 个本征矢量.动量矩阵元 $\mathbf{p}_{ij}(k_1)$ 由下式给出:

$$\begin{aligned} p_{ij} &= \sum_{\alpha, \beta, \tau} F_{i, k_1}^*(\alpha, \mathbf{R}_e) G_{j, k_1}(\beta, \mathbf{R}_h + \tau) \\ &\times u_\alpha(\mathbf{R}_e) | \hat{\epsilon} \cdot \mathbf{p} | u_\beta(\mathbf{R}_h + \tau). \end{aligned} \quad (6)$$

没有带混合时,子导带态退化至纯类 s 态,子价带态退化到纯类 p 态.那样,只需要元素

$$u_s(\mathbf{R}_e) | p_\alpha | u_{p\alpha}(\mathbf{R}_e) = \sqrt{m_0 E_p / 2},$$

结果也变得与有效质量方法所得的相似.

为得到一个光滑的吸收谱,我们用有半宽度为 Γ 的 Lorentzian 函数来代替方程(1)中的 δ 函数,

$$\delta(E_i - E) \approx \Gamma / \{\pi [E_i - E]^2 + \Gamma^2\}, \quad (7)$$

Γ 是由不均匀扩展引起的能量宽度,它被取为 0.02eV.

3. 讨论及结果

我们已对图4所描述的、具有不同合金混合度和不同横向调制周期(L)的 QWR 结构的子带间和

带间吸收谱进行了计算. 从中可以发现, 子带间吸收谱对周期长度 L 很敏感, 但却很不受混合度 x_m 的影响. 因此, 我们只给出有适度合金混合度的情形下的结果(以参数 $b = 3.3\text{nm}$ 和 $x_m = 1.0$ 为特性). 在用 VFF 模型对应变分布进行的计算中, QWR 的底层原子被 InP 所限制, 而上层原子和 GaAs 覆层原子可以自由运动. 这与文献 [34] 中所示的非夹紧结构相对应. 迄今为止, 绝大多数实际的实验研究的 QWR 结构的光学性质更靠近未夹紧结构^[13-17].

对于不同的 QWR 周期长度, 应变分布性质性的与文献 [34] 中所示的相似. 随着 L 的减小, 富 In 区(图 1 所示的 QWR 元胞的 B 区)的流体静力学应变增加, 而它在富 Ga 区(A 区)减小. 双轴应变分量随 L 以与流体静力学成分相比相反的方式变化.

图 3 描绘由在此考虑的两个 QWR 结构($L = 50a_{[110]}$ 和 $L = 40a_{[110]}$)中, 一个电子感受到的由 SILO 所引起的势能变化分布剖面. 实(虚)线用于表示有(没有)合金混合情形的模型的结果. 从电势剖面中, 可以看出基态的电子和空穴都横向限制在 QWR 的 B 区. 有金属混合($x_m = 1.0, b = 8a_{[110]}$)对($L = 50a_{[110]}$ 和 $L = 40a_{[110]}$)的自组织 QWR 导带结构的影响显示在图 4 中. 所有的子带都是一个有弱自旋分裂(在所示的尺度内看不见)的对组合. 第一(C1)和第三(C3)对导带在 k_2 方向上几乎无色散, 而第二(C2)和第四(C4)对导带在 k_2 方向上则有相当的色散. 将最低四对子导带态(C1—C4)的包络函数与用主量子数(n_y, n_z)标识的矩形量子盒的解相比, 我们分别确认它们为(1,1)(2,1)(1,2)和(3,1)态. 这样, C1 和 C3 态被很好地限制在横向方向上, C2 和 C4 则由于它们 y' 成分的波函数(有高主量子数)的大的延伸而较少局限在 y' 方向上, 其相应的子带沿 k_2 方向有相当大的色散. 第一个两对(C1—C2)间的子带间跃迁产生最重要的 IR 响应. $L = 40a_{[110]}$ 时子带 C2 和 C3 在 $k_2 = 0$ 处几乎简并(由偶然简并引起), 且(2,1)和(1,2)性质强烈地混合. 然而, 对于有限的 k_2 , 简并解除(由于(2,1)态的较大的色散), 而且它们不再混合.

图 5 显示了 $L = 50a_{[110]}$ 和 $L = 40a_{[110]}$ 有混合($x_m = 1.0, b = 330\text{nm}$)的自组织 QWR 的子价带结构. 所有子价带沿 k_1 都有相当大地自旋分裂性, 且最高的四对子价带(V1—V4)沿 k_2 几乎无色散, 这

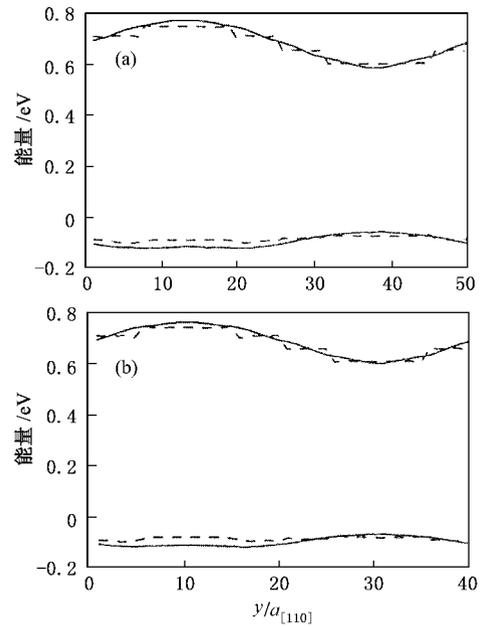


图 3 自组织 QWR 结构的导带和价带边 (a) $L = 50a_{[110]}$, (b) $L = 40a_{[110]}$. 虚线是没有合金混合的情形. 实线是合金混合 $x_m = 1.0, b = 8a_{[110]}$

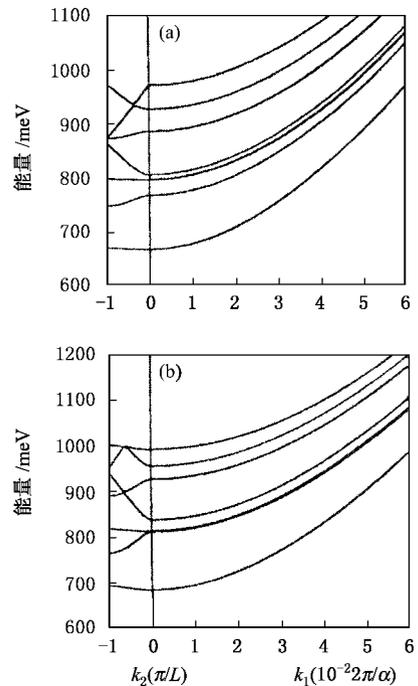


图 4 自组织 QWR 结构的导带结构 (a) $L = 50a_{[110]}$, (b) $L = 40a_{[110]}$ 合金混合 $x_m = 1.0, b = 8a_{[110]}$

说明了有强横向限制效应发生. 能量低于 -130meV 的子价带态对应于非局域态, 因此它们分布密集.

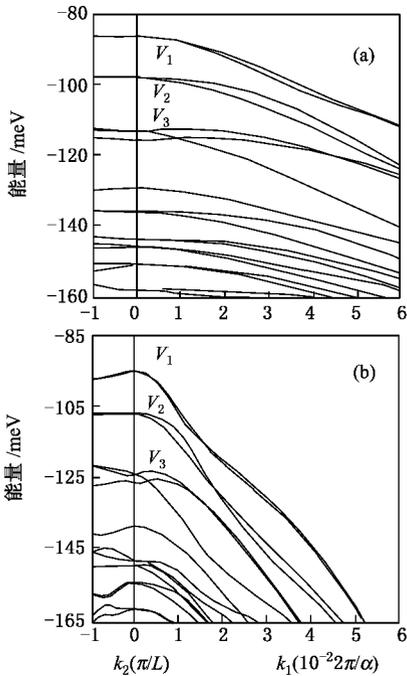


图5 自组织 QWR 结构的价带结构 (a) $L = 50 a_{[110]}$, (b) $L = 40 a_{[110]}$ 合金混合 $x_m = 1.0$, $b = 8 a_{[110]}$

3.1. 子带间吸收

子带间吸收谱是确定自组织量子线在 IR 探测中实用性的最重要的物理参考特征. 图 6 列出了计算所得出的三个周期长度分别为 $L = 72 a_{[110]}$, $50 a_{[110]}$ 和 $40 a_{[110]}$ (分别约为 30, 20 和 16nm) 的自组织 QWR 结构(图 1 所示)的子带间吸收谱. 在计算中, 假定这些 QWR 结构都是 n 型掺杂的, 线性载流子密度约 $1.2 \times 10^6 / \text{cm}$ (这与 Fermi 能级处在导带底上 25meV 相一致).

为了比较, 我们列出沿 $[110]$ 方向(实线)和 $[001]$ 方向(虚线)的偏振矢量的结果. 因为我们在模型计算中采用了 $[1\bar{1}0]$ 方向的严格平移不变性, 该方向偏振强度结果为 0.

对于这里所涉及的三种情形, 正入射(对于 $[110]$ 偏振的)子带间跃迁的峰值位置分别为 65, 95, 125meV. 它们都在 IR 探测器所需的范围内. 正如所设想的, 跃迁能量随着横向限制周期 L 的减小而增加. 然而, 当继续减小周期长度 L 时, 跃迁谱在能量约为 125meV 处达到饱和. 这是因为子带的分立谱到连续谱的转变在 $L = 40 a_{[110]}$ 已经达到.

$[110]$ 偏振峰的吸收强度从 $L = 72 a_{[110]}$ 时的 6000/cm 减小到 $L = 40 a_{[110]}$ 时的 3000/cm. 这主要是因为 α 与 $\hbar\omega$ 成反比(见方程 2)和较窄的 QWR C2 子带上递增的色散所引起的能量上峰值的发散. 对于所述的三种情形 $[001]$ 偏振的子带间吸收峰值都在 125meV 处. 这一跃迁中的激发态是 C3 子带, 它与 $(n_y, n_z) = (1, 2)$ 态相对应. 因此, 它与典型的 QWIP 结构中所用的子带间跃迁有相同的物理起源. 尽管这个峰值对于正入射的 IR 探测没有用处, 但如果在表面放一个衍射光栅(如在 QWIP 配置中所做的一样), 它就可以用作一个第二种色探测器. 在这方面, IR 探测器(对于情形 1 和情形 2 来说)是独特的. 它在两个明显不同的波长(它们是偏振依赖的)有强窄带吸收. 对于情形 3 ($1, 2$)和 $(2, 1)$ 态的能量位置几乎一致(两个都靠近量子阱顶部), 这样使得 $[110]$ 和 $[001]$ 偏振的子带间吸收谱在几乎相同的位置达到峰值. 对于 $[001]$ 偏振峰, 吸收强度从 $L = 72 a_{[110]}$ 时的 5000/cm 增加到 $L = 40 a_{[110]}$ 时的 8000/cm. 这主要是因为 α 与 QWR 的横截面积成反比所致.

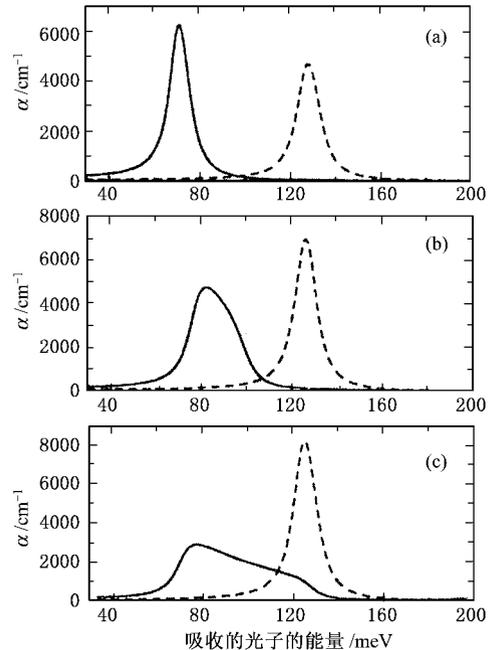


图6 表面未固定 QWR 的价带间吸收谱($x_m = 1.0$, $b = 8 a_{[110]}$) (a) $L = 72 a_{[110]}$, (b) $L = 50 a_{[110]}$, (c) $L = 40 a_{[110]}$. 实线为 $[110]$ 极化, 虚线为 $[001]$ 极化

3.2. 带间吸收

带间跃迁对于自组织 QWR 的描述很重要, 因为它们容易通过光致发光(PL)或光学跃迁实验进

行观察.对于 IR 探测器应用,它们在 IR 波长中段提供另一个吸收峰,这可以与远 IR 波长处发生的子带间跃迁一起用于多色探测.因此,为了理解自组织 QWR 结构的全部作用,我们也需要分析带间吸收.

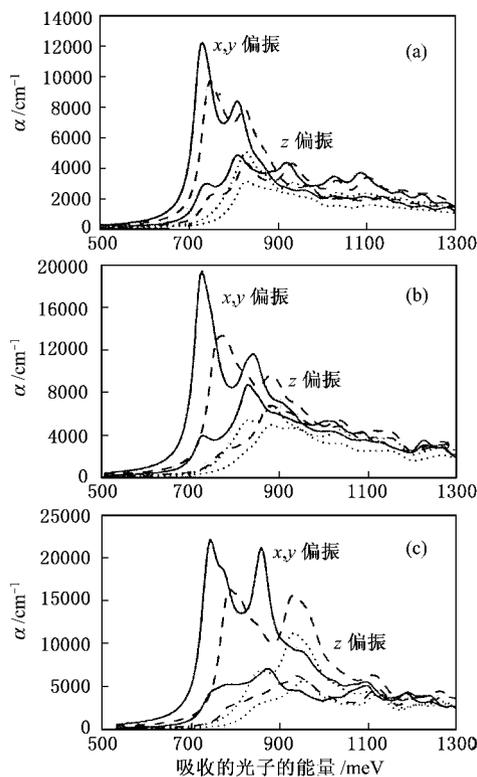


图 7 表面未固定 QWR 的带间吸收谱($x_m = 1.0$, $b = 8a_{[110]}$) (a) $L = 72a_{[110]}$, (b) $L = 50a_{[110]}$, (c) $L = 40a_{[110]}$. 实线为未掺杂且有激子效应, 虚线为未掺杂没有激子效应 001 极化, 点线为掺杂没有激子效应. 大强度的曲线是正入射未极化的光, 小强度的曲线是 001 极化的光

图 7 显示了 (a) $L = 72a_{[110]}$, (b) $L = 50a_{[110]}$, (c) $L = 40a_{[110]}$ 时, 自组织 QWR 的带间吸收谱. 我们考虑了掺杂和未掺杂两种样本的情形. 未掺杂样本的结果用实线(有激子效应)和虚线(无激子效应)表示. 上面标为 x, y 偏振的曲线组是 x, y 偏振的平均吸收值. 下面标为 z 偏振的曲线组是沿 z 轴的偏振. 有合金混合($x_m = 1.0$, $b = 3.3\text{nm}$)的、 $L = 72a_{[110]}$ 结构的 PL 性质在我们以前的文章^[33, 34]中进行过研究. QWR 结构有一个峰约为 0.74eV , PL 偏振比 $P_{[1\bar{1}0]}^2/P_{[110]}^2$ 约为 2.2. 这个结构在有激子效应时的吸收系数有一个峰值强度约为 $10^4/\text{cm}$. 基态激子的结合能(主要是在顶子价带和最低子导带之间)大约是 20meV . 这样, 峰位置从 0.76eV (无激子效应)变到 0.74eV (有激子效应). 激子效应使峰值强度增加了

约 20%.

对于 $L = 50a_{[110]}$ 和 $L = 40a_{[110]}$ 的 QWR 结构, 我们发现稍强的激子峰和相似的吸收谱. 激子结合能分别约为 30meV 和 40meV . 增强了的峰值强度和更大的激子结合能都是由对电子和空穴更强的横向限制所致. 对于为中 IR 探测器应用而生长的样本(掺杂浓度低于 $1.2 \times 10^6/\text{cm}$), 吸收谱应该处在这里列举的未掺杂(实线)和高浓度掺杂(虚线)情形之间变化. 至今为止, 没有有关我们所设计的这些结构的实验. 从而有关这些 IR 探测器的实验是需要的.

4. 结 论

我们研究了 IR 探测器应用中自组织 InGaAs QWR 的子带间和带间吸收谱. 我们考虑了详细的带结构、微观应力分布和激子效应. 这里我们也研究了一系列通过应变引起的横向成序过程生长的实际结构. 研究发现, 自组织 InGaAs QWR 是多色 IR 探测器材料很好的候选者. 它们提供了两组强 IR 峰: 一组在远 IR 段, 波长覆盖 $0-20\mu\text{m}$ (通过子带间跃迁); 另一个在中 IR 段, 波长小于 $1.5\mu\text{m}$ (通过带间跃迁). 由于存在应变引起的横向调制, 子带间跃迁对于沿调制方向偏振的正入射光来说很强. 吸收系数约为 $10^4/\text{cm}$ (对于掺杂浓度为 $1.2 \times 10^6/\text{cm}$ 的情形). 这使自组织 InGaAs 量子线对于其他用于 IR 探测的量子阱系统有一个更明显的优势.

已经发现, 子带间吸收对横向调制的周期长度 (L) 很敏感. 当周期长度从 30nm 减小到 16nm 时, 峰值从 60meV 变到 120meV , 而再减小周期长度不会进一步改变吸收峰位置. 因为这时激发态变成横向无禁闭的了.

对于带间跃迁, 我们发现激发子效应使吸收峰强度增加约 20%—50%, 并使峰值位置改变约 20—50meV (未掺杂情形). 这些结果对于材料的特征化刻划和设计中的 IR 探测器是有用的. 我们发现周期长度 L 的减小导致较强的横向限制、更大的激子结合和更强的吸收强度. 对于掺杂情形(其子带间跃迁被研究过), 带间跃迁无激子效应情形在中 IR 段(波长小于 $1.5\mu\text{m}$) 提供了一个强度为 $4000-10000/\text{cm}$ 的宽带吸收. 这一个在 $10\mu\text{m}$ 附近的中 IR 吸收和窄带的远 IR 吸收的同时存在为多色 IR 探测应用提供了一个独特的组合.

总之, 本文成功地演示了自组织 GaInAs QWR

是很有潜力的 IR 探测器材料. 并为实际 QWR 结构的光学性质提供了理论模型, 这可以为未来的 QWR 红外探测器的制造提供强有力的指导.

作者李良新感谢 University of Illinois at Urbana-Champaign 的 Y. C. Chang 教授的帮助和讨论.

- [1] Levine B F 1993 *J. Appl. Phys.* **74** R1
- [2] Liu H C , Levine B F and Anderson J Y 1994 *Quantum Well Intersubband Transition Physics and Devices* (Dordrecht , Netherlands : Kluwer)
- [3] Tidrow M Z and Bacher K 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 3396
- [4] Maimon S *et al* 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 800
- [5] Kapon E *et al* 1990 *Appl. Phys. Lett.* **56** 1825
Yuan X Z , Lu W and Li N 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 503 (in Chinese) [袁先漳、陆卫、李宁 2003 物理学报 **52** 503]
- [6] Tsuchiya M 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 466
- [7] Hasegawa S *et al* 1991 *J. Crystal Growth.* **111** 371
- [8] Notzel R and Ploog K 1992 *J. Vac. Sci. Technol. A* **10** 617
- [9] Miyake Y *et al* 1993 *J. Quantum Electron.* **QE-29** 2123
- [10] Kim S J *et al* 1996 *J. Appl. Phys.* **35** 4225
- [11] Tang Y *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **53** R10501
- [12] Chou S T *et al* 1995 *Appl. Phys. Lett.* **17** 2220
Chou S T *et al* 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 6270
Chou S T *et al* 1995 *J. Vac. Sci. Technol. B* **13** 650
Cheng K Y , Hsien K C and Baillargeon J N 1992 *Appl. Phys. Lett.* **60** 2892
- [13] Wohlert D E *et al* 1996 *Appl. Phys. Lett.* **17** 2386
- [14] Cheng K Y 1997 *Proceedings of the twenty-seventh state-of-the-art program on compound semiconductors* (SOTOPOCSXXVII). Electrochem. Soc. 154 (NJ , USA : Pennington)
- [15] Wohlert D E , Chou S T and Cheng K Y , 1997 *J. Crystal Growth.* **175-176** 1162
- [16] Moy A M , Pickrell G W and Cheng K Y 1998 *J. Vac. Sci. Technol. B* **16** 1347
- [17] Chou S T *et al* 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 3469
- Zhu T W , Zhang Y C and Xu B 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2087 (in Chinese) [朱天伟、张元常、徐波 2003 物理学报 **52** 2087]
- [18] Wohlert D E and Cheng K Y 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2247
- [19] Eaglesham D J and Cerullo M 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1943
- [20] Solomon G S *et al* 1996. *Phys. Rev. Lett.* **76** 952
- [21] Mukhametzanov I , Wei Z , Heitz R and Madhukar A 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 85
Zhou B , Wu S Q and He D J 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 592 (in Chinese) [周波、吴绍全、贺大江 2003 物理学报 **53** 592]
- [22] Grundmann M , Stier O and Bimberg D 1995 *Phys. Rev. B* **52** 11969
- [23] Grundmann M , Stier O and Bimberg D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5688
Hong D H , Jia T Q and Xu Z Z 2003 *Acta Phys. Sin.* **53** 1016 (in Chinese) [冯东海、贾天卿、徐至展 2003 物理学报 **53** 1016]
- [24] Wohlert D E and Cheng K Y 2000 *private communications*
- [25] Chang Y C 1988 *Phys. Rev. B* **37** 8215
- [26] Keating P N 1966 *Phys. Rev.* **145** 637
- [27] Martin R M 1969 *Phys. Rev. B* **1** 4005
- [28] Jiang H and Singh J 1997 *Phys. Rev. B* **56** 4696
- [29] Keyes R J 1980 *Optical and infrared Detectors* (New York : Springer - Verlag)
- [30] Houg M P and Chang Y C 1989 *J. Appl. Phys.* **65** 3096
- [31] Citrin D S and Chang Y C 1991 *Phys. Rev. B* **43** 11703
- [32] Sun S and Chang Y C 2000 *Phys. Rev. B* **62** 13631
- [33] Li L X and Chang Y C 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 6162
- [34] Li L X , Sun S and Chang Y C 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 2251
- [35] Kane E O 1956 *J. Phys. Chem. Solids.* **1** 82
- [36] Li L X , Sun S and Chang Y C 2003 *Infrared Physics & Technology* **44** 57

Intersubband and intraband transitions of self-assembled quantum wires for the Infrared detectors^{*}

Li Liang-Xin[†] Hu Yong-Hua

(Department of Applied Physics , Hunan University , Changsha 410082 , China)

(Received 7 January 2004 ; revised manuscript received 27 April 2004)

Abstract

This paper have studied the structures、microstrain distributions、and optical properties of self – assembled quantum wires $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ made of short – period superlattices with strain induced lateral ordering. The research has taken into account of valence – band anisotropy , band mixing and effects due to microstrain distributions at the atomistic level. The results show that the self-assembled QWRs have favorable optical properties for application in infrared detection with normal incidence. The wavelength for subband transitions ranges from 10 to $20\mu\text{m}$ with the length of QWR period varying from 15 to 30nm. The wavelength for inter – band absorption is in the mid-IR range.

Keywords : self-assembled , microstrain , infra-red detectors , quantum wires

PACC : 7000 , 7115F , 7320D

^{*} Project supported by the Extraordinary Ability Researchers ' Funds of Hunan University.

[†] E-mail : hongleeee@sina.com