

# 空穴在动量空间分布对 p 型量子阱红外探测器 响应光谱的影响\*

周旭昌 陈效双 甄红楼 陆 卫

(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)

(2005 年 7 月 11 日收到, 2006 年 3 月 28 日收到修改稿)

通过对 p 型量子阱红外探测器(QWIP)的自洽计算,得到了量子阱价带的电子结构和器件的光电流谱,并研究了载流子在动量空间分布对 p 型 QWIP 光谱响应的影响.计算结果表明,在动量空间不同区域的空穴对器件的光谱响应起着不同作用,从而使得在 p 型 QWIP 中,空穴浓度和温度都将影响器件的响应光谱.所得结果合理地解释了实验中器件响应光谱随掺杂浓度和温度的变化.

关键词: p 型量子阱红外探测器, 响应光谱, 空穴浓度, 温度

PACC: 7320D, 0762

## 1. 引 言

自 1983 年 Smith 等<sup>[1]</sup>首次研究 GaAs/AlGaAs 量子阱红外探测器(QWIP)以来, QWIP 器件以其材料生长和器件制备工艺成熟、响应波长易控制、成品率高以及成本低等优点而逐渐成为了一种重要的光子型红外探测器,并已经发展到焦平面阵列以及多色器件<sup>[2-6]</sup>.目前常用的 QWIP 器件通常采用 n 型掺杂,但 n 型 QWIP 对正入射光不吸收,必须通过刻蚀光栅,从而在大规模焦平面 QWIP 器件制备中增加了制备的难度和成本.而 p 型 QWIP 具有能对正入射光响应的特点,无需光栅,所以 p 型量子阱在焦平面器件上有着独特的应用价值.针对 p 型量子阱在红外成像上的独特优势,近年来人们对 p 型 QWIP 开展了一系列研究<sup>[7-13]</sup>.

在量子阱的导带中,电子能带呈抛物线结构,子带间跃迁能量和跃迁矩阵元将不随电子在动量空间的位置而变化,所以研究 n 型量子阱的光电性质时,通常只需研究电子在  $\Gamma$  点的跃迁及简单动量空间积分.而在价带中,由于轻重空穴的相互耦合作用,其子带结构大大偏离了抛物线形状,这使得子带间跃迁能量以及跃迁矩阵元都会随动量空间的  $K$  点而变化<sup>[9,10]</sup>,所以 p 型 QWIP 的响应光谱需在布里渊

区积分,计算复杂.尽管有少量文献计算过 p 型 QWIP 的响应光谱<sup>[10]</sup>,但尚未见文献详细地研究载流子在动量空间的分布对 p 型 QWIP 响应光谱的影响.本文通过自洽计算获得了 p 型 QWIP 的子带电子结构及其正入射响应光谱,并通过改变载流子浓度和温度分析载流子在动量空间的分布对器件的光电流谱的影响.

## 2. 理论模型

### 2.1. p 型量子阱电子结构的计算

在有效质量近似下,量子阱中空穴的哈密顿量为

$$H = H_L + V(z), \quad (1)$$

式中,  $V(z)$  为量子阱的势分布,  $H_L$  为 Luttinger-Kohn 哈密顿量<sup>[10-13]</sup>,

$$H_L = \frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} P_1 & Q & R & 0 \\ Q^* & P_2 & 0 & R \\ R^* & 0 & P_2 & -Q \\ 0 & R^* & -Q^* & P_1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中,

$$P_1 = (\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2,$$

\* 国家自然科学基金创新研究群体(批准号:60221502)、国家自然科学基金(批准号:10234040,60476040,60576068)和国家重点基础研究发展规划(批准号:2001CB610407)资助的课题.

$$P_2 = (\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2,$$

$$Q = -i2\sqrt{3}\gamma_3 k_z(k_x - ik_y),$$

$$R = \sqrt{3}[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - i2\gamma_3 k_x k_y].$$

这里  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  为价带的 Luttiger 常数,  $R^*$  和  $Q^*$  分别为  $R$  和  $Q$  的哈密顿共轭量,  $k_x$  和  $k_y$  是垂直于生长方向的波矢,  $k_z$  为平行于生长方向的波矢,

$$k_z = k + mK,$$

$$K = 2\pi/L,$$

其中  $L$  为量子阱的周期,  $k$  为超晶格量子阱的简约布里渊区内垂直于界面方向的波矢,

$$-K/2 < k < K/2.$$

量子阱价带空穴波函数可用下式表示<sup>[14]</sup>:

$$|n, \mathbf{k}_{\parallel}\rangle = \sum_{k_z} F_{\nu}(n, \mathbf{k}_{\parallel}, k_z) | \nu, \mathbf{k} \rangle, \quad (3)$$

式中  $n$  为价带子带的序数,  $\mathbf{k}_{\parallel}$  为平行于界面方向的波矢,

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\parallel} + k_z \mathbf{z};$$

$\nu$  为角动量的  $z$  分量 ( $\nu = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ );

$F_{\nu}(n, \mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$  可通过多带有效质量方程(4)的求解获得

$$\sum_{\nu} H_{\nu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, k_z) F_{\nu}(n, \mathbf{k}_{\parallel}, k_z) = E_n(\mathbf{k}_{\parallel}, k_z) F_{\nu}(n, \mathbf{k}_{\parallel}, k_z). \quad (4)$$

空穴的包络波函数  $F_{\nu}(n, \mathbf{k}_{\parallel}, z)$  用傅里叶变换展开表示为

$$F_{\nu}(n, \mathbf{k}_{\parallel}, z) = \sum_{k_z} F_{\nu}(n, \mathbf{k}_{\parallel}, k_z) e^{ik_z z}. \quad (5)$$

采用如文献[7, 8]中的平面波展开方法对方程(4)求解, 就能得到价带的子带结构和包络波函数.

对于掺杂的量子阱结构, 通常需要薛定谔方程和泊松方程的自洽计算来确定其电子结构. 倒易空

间的泊松方程为

$$V_{qk}(K_m) = \frac{1}{\epsilon} \frac{1}{K_m^2} [N_A(K_m) - p(K_m)], \quad (6)$$

$$K_m = m \frac{2\pi}{L} \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots),$$

式中  $V_{qk}(K_m), N_A(K_m)$  和  $p(K_m)$  分别为静电势、杂质分布函数和空穴分布函数的傅里叶级数展开.

## 2.2. p 型 QWIP 的光谱响应

当红外光入射到 p 型量子阱中时, 空穴吸收红外光子, 并从价带  $n$  子带跃迁到  $n'$  子带, 则 p 型量子阱的光吸收系数为<sup>[9]</sup>

$$\alpha_{n, n'}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\epsilon^{1/2} m_0^2 \omega c} \times \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} [f_n(\mathbf{k}_{\parallel}) - f_{n'}(\mathbf{k}_{\parallel})] |\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P}_{m m'}(\mathbf{k}_{\parallel})|^2 \times \frac{\hbar \Gamma_{m m'} / \pi}{[\Delta_{m m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) - \hbar\omega] + i[\hbar \Gamma_{m m'}]}. \quad (7)$$

这里  $\epsilon$  是材料的介电常数,  $m_0$  是自由电子质量,  $\hat{\epsilon}$  是入射电磁场矢势的单位矢量,  $\Delta_{m m'}(\mathbf{k}_{\parallel}) = |E_{n'}(\mathbf{k}_{\parallel}) - E_n(\mathbf{k}_{\parallel})|$ ,  $E_n(\mathbf{k}_{\parallel})$  是子带  $n$  的能量,  $\mathbf{P}_{m m'}(\mathbf{k}_{\parallel})$  是跃迁动量矩阵元,  $f_n(\mathbf{k}_{\parallel})$  是子带  $n$  的载流子费米-狄拉克分布函数, 而  $\Gamma_{m m'}(\mathbf{k}_{\parallel})$  是空穴态  $|n, \mathbf{k}_{\parallel}\rangle$  和  $|n', \mathbf{k}_{\parallel}\rangle$  之间的平均散射率, 价带子带间跃迁矩阵元  $\mathbf{P}_{m m'}(\mathbf{k}_{\parallel})$  为<sup>[9]</sup>

$$\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P}_{m m'} = \hbar \hat{\epsilon} \sum_{\nu, \nu'} (\mathbf{P}_{\nu \nu'} O_{\nu \nu'}^{m m'} + \mathbf{Q}_{\nu \nu'} D_{\nu \nu'}^{m m'}), \quad (8)$$

式中  $\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P}_{\nu \nu'}$  和  $\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{Q}_{\nu \nu'}$  是  $4 \times 4$  矩阵  $\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P}$  和  $\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{Q}$  的矩阵元. 量子阱材料的生长方向为  $z$  轴方向,  $x$  和  $y$  则在垂直于  $z$  方向的平面内. 在红外光正入射, 电磁波电场分量平行  $x$  方向时,  $\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P}$  和  $\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{Q}$  可分别表示为

$$\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \gamma_1 k_x + \gamma_2 k_x & 0 & -2\sqrt{3}(\gamma_2 k_x - i\gamma_3 k_y) & 0 \\ 0 & \gamma_1 k_x - \gamma_2 k_x & 0 & -2\sqrt{3}(\gamma_2 k_x - i\gamma_3 k_y) \\ -2\sqrt{3}(\gamma_2 k_x + i\gamma_3 k_y) & 0 & \gamma_1 k_x - \gamma_2 k_x & 0 \\ 0 & -2\sqrt{3}(\gamma_2 k_x + i\gamma_3 k_y) & 0 & \gamma_1 k_x + \gamma_2 k_x \end{bmatrix}, \quad (9)$$

$$\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 0 & -2\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 \\ -2\sqrt{3}\gamma_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\sqrt{3}\gamma_3 \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3}\gamma_3 & 0 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

(8) 式中的矩阵元  $O_{\nu\nu'}^{m'}$  和  $D_{\nu\nu'}^{m'}$  定义为<sup>[9]</sup>

$$O_{\nu\nu'}^{m'} = \int F_{\nu}^*(n, \mathbf{k}_{//}, z) F_{\nu'}(n', \mathbf{k}_{//}, z) dz, \quad (11)$$

$$D_{\nu\nu'}^{m'} = \int F_{\nu}^*(n, \mathbf{k}_{//}, z) \frac{\partial}{\partial z} F_{\nu'}(n', \mathbf{k}_{//}, z) dz. \quad (12)$$

在 p 型 QWIP 中, 入射光正入射进入器件中, 并被衬底和器件表面多次反射, 前两次吸收为主要贡献, 因此器件的量子效率  $\eta(\omega)$  可表示为

$$\eta(\omega) = (1 - r) \chi (1 - e^{-2\alpha(\omega)l}), \quad (13)$$

式中,  $r$  是 GaAs 的反射系数 ( $r = 0.28$ ),  $l$  是量子阱的总厚度. 通常 p 型 QWIP 对红外光子的吸收效率较低,  $\alpha(\omega)l$  较小, (13) 式简化为<sup>[14]</sup>

$$\eta(\omega) = \chi (1 - r) \alpha(\omega) l. \quad (14)$$

故器件的光电流响应谱由下式决定<sup>[15]</sup>:

$$J_{\omega} = e \eta(\omega) \mu F_z \left[ 1 + \left( \frac{\mu F_z}{\nu_s} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (15)$$

式中,  $\nu_s$  是饱和迁移速率,  $\mu$  是低场载流子迁移率,  $F_z$  是电场强度.

### 3. 计算结果及分析

#### 3.1. p 型量子阱价带的子带结构

我们对 p 型 QWIP 中空穴子带结构进行了计算. 量子阱的结构采用文献 [11] 中的参数, 所用材料是 GaAs/AlGaAs 材料, 势垒中 Al 组分为 0.29, 阱宽为 4 nm.

量子阱的能带色散关系和态密度计算结果如图 1 和图 2 所示, 其中掺杂面密度  $N_s = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , 温度  $T = 77 \text{ K}$ . 由图 1、图 2 可以看到, 由于轻重空穴的耦合作用, 价带的色散关系非常复杂, 体系的有效质量与能量和波矢 ( $k_x, k_y$ ) 相关, 其态密度也不再是导带中电子态密度的阶梯形状. 在上述掺杂以及温度条件下, 费米能级  $E_F = -35.77 \text{ meV}$ , 则空穴主要聚集在基态能级的  $\Gamma$  点附近.

在 p 型 QWIP 中, 掺杂面密度  $N_s$  在  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  数量级, 工作温度低于 80 K. 此时, 空穴主要分布在基态能级, 所以我们主要关心基态能级上载流子的性质.

当在  $\Gamma$  点 ( $k_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = 0$ ) 时, 载流子为重空穴 (图 2 中表示为 HH) 或轻空穴 (图 2 中表示为

LH), 当  $k_{//} \neq 0$  时, 轻重空穴互相混合, 即载流子不再是单纯的轻空穴或重空穴. 从图 2 中可看到, 在  $k_{//} < 0.36 \text{ nm}^{-1}$  和  $k_{//} > 0.36 \text{ nm}^{-1}$  时, 基态 HH 上的  $E-K$  色散曲线表现出不同的变化规律, 其中当  $k_{//} < 0.36 \text{ nm}^{-1}$  时, 色散曲线二阶导数  $\frac{d^2 E}{dk^2}$  的绝对值更小, 其有效质量也更大. 故可推断出, 当  $k_{//} \in (0, 0.36) \text{ nm}^{-1}$  时, 基态上的载流子除了重空穴特性外也包含轻空穴少量的贡献, 而当  $k_{//} > 0.36 \text{ nm}^{-1}$  时, 因为轻重空穴的混合效应加强, 载流子将包含较多的轻空穴特性. 为便于下面的讨论, 我们将重空穴中含有较少的轻空穴特性的动量空间区域称为区域 I, 而将含有较多轻空穴特性的动量区域称为区域 II, 如图 2 所示.

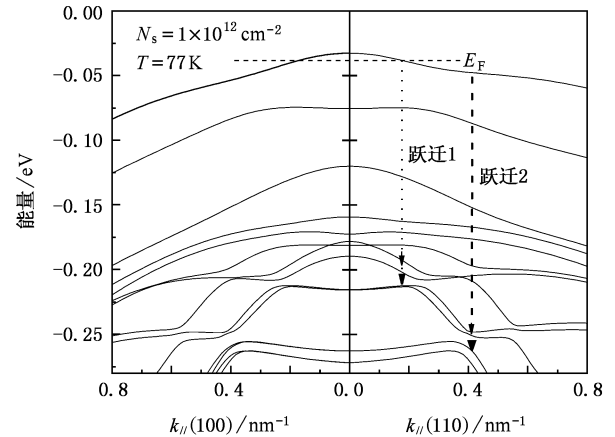


图 1 p 型掺杂量子阱的空穴子带结构. 点线 (跃迁 1) 和虚线 (跃迁 2) 分别表示区域 I 和区域 II 中的峰值响应跃迁

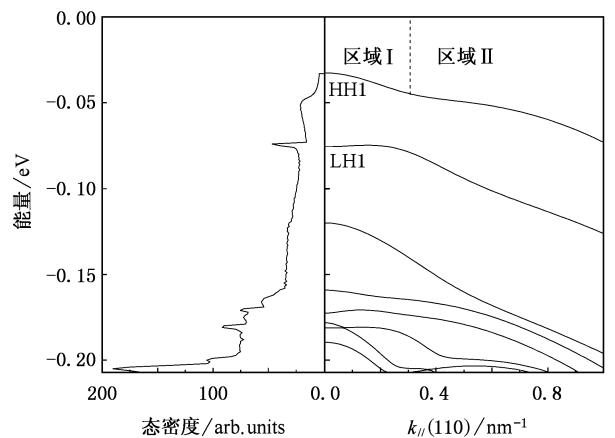


图 2 p 型掺杂量子阱的态密度. 区域 I 和区域 II 与图 1 相对应

### 3.2. p 型 QWIP 的光电流响应谱

通过对布里渊区积分  $k_x, k_y \in (0, 1.0) \text{nm}^{-1}$ , 我们获得了正入射条件下 p 型 QWIP 的光电流响应谱. 其掺杂面密度  $N_s = 1 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ , 温度  $T = 77 \text{K}$ . 如图 3 所示, 本文的计算结果与文献 [11] 中的结果在峰位以及形状上都符合. 从图 3 可以看出, 该 p 型 QWIP 的响应峰位在  $165 \text{meV}$  ( $7.5 \mu\text{m}$ ) 处, 远高于基态子能级  $\Gamma$  点到势垒的能量 ( $130 \text{meV}$ ), 所以其光电流响应源于束缚态-连续态的跃迁.

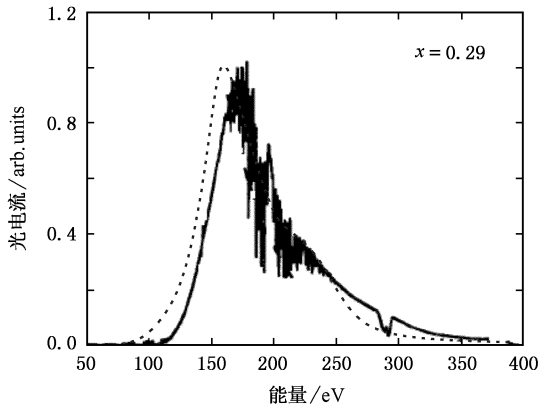


图 3 p 型 QWIP 的光电流谱. 实线为文献 [11] 中的实验结果, 虚线为本文的理论计算结果

Chang 等<sup>[9]</sup>的计算表明, 在量子阱价带中, 空穴在子带能级之间的跃迁能量和跃迁矩阵元随空穴在动量空间的位置而变化. 所以在 p 型 QWIP 中, 载流子在动量空间的分布将可能影响器件的光谱响应性能. 故在此我们按以上的分区, 分别计算了区域 I 和区域 II 中空穴光跃迁所形成的光电流谱, 结果如图 4 所示. 从计算结果中可看出, 区域 I 中的载流子和区域 II 中载流子对器件的光电流响应谱有着不同的贡献. 区域 I 中载流子的光电流谱响应峰值在  $7.5 \mu\text{m}$  处, 而区域 II 中载流子的光电流谱峰值在  $5.5 \mu\text{m}$  ( $225 \text{meV}$ ) 处. 两个区域中载流子的峰值响应所对应的子带跃迁如图 1 所示. 在实际条件下, 载流子的浓度和温度都会影响载流子在动量空间的分布, 所以我们在下面要研究这两种条件对 p 型 QWIP 光谱响应的影响.

我们首先研究了载流子浓度对 p 型 QWIP 光谱响应的影响. 在实验中可通过掺杂或载流子注入来改变量子阱中载流子的浓度. 我们计算了  $77 \text{K}$  条件下 QWIP 的光电流谱, 结果如图 5 所示. 由图 5 可见, 随着载流子浓度的提高, 器件的响应增强, 而且

QWIP 的响应谱形状也发生了变化, 即在中波区域 ( $5.5 \mu\text{m}$ ) 逐渐出现了一个新的响应峰. 这主要是因为随着掺杂浓度的提高区域 II 中的载流子逐渐增多, 所以器件在中波的响应会增强, 并使得器件的响应谱发生变化.

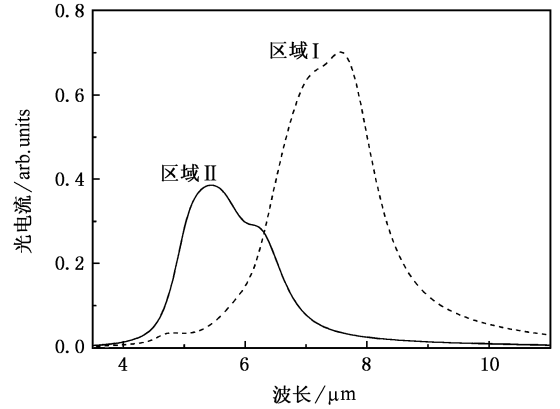


图 4 区域 I 和区域 II 中载流子对 QWIP 光电流谱的贡献.  $N_s = 3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ ,  $T = 77 \text{K}$

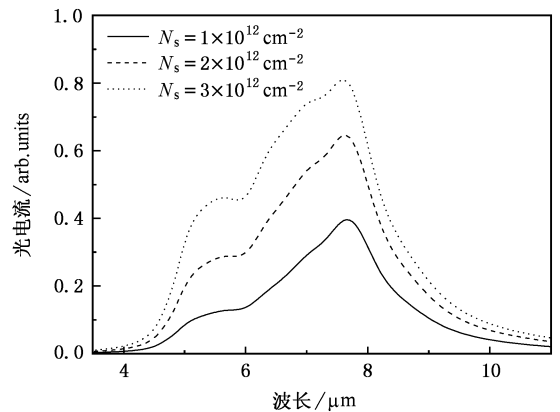


图 5 不同载流子浓度条件下 QWIP 的光电流谱.  $T = 77 \text{K}$

在不同温度下 p 型 QWIP 的光电流谱如图 6 所示. 我们发现随着温度的上升, 器件在  $7.6 \mu\text{m}$  处的响应逐渐减弱, 而在  $5.5 \mu\text{m}$  处也出现了一个峰值响应. 这主要是由于载流子的分布遵循费米-狄拉克函数, 当温度升高时低能区域的空穴增多, 即区域 II 中的载流子逐渐增多, 而在  $\Gamma$  点附近重空穴特性的载流子逐渐减少, 所以器件在  $7.6 \mu\text{m}$  处的响应逐渐减弱, 而在  $5.5 \mu\text{m}$  处的峰值响应逐渐增强. 当量子阱中载流子浓度较高时, 区域 II 中载流子数量随温度变化将更显著, 所以以上随温度变化的现象在载流子浓度较高的情况下更为明显.

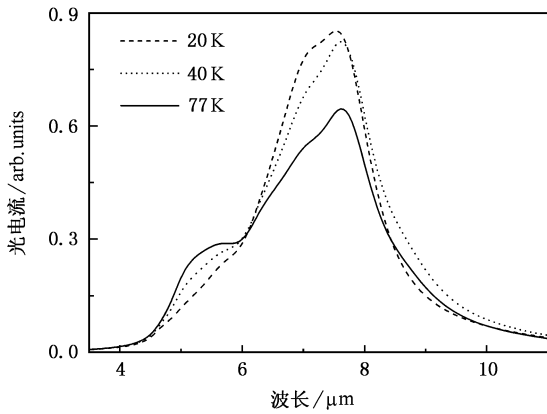


图6 不同温度下 QWIP 的光电流谱  $N_s = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

在实验上,为增强对比性,我们继续采用文献 [11] 的器件结果. Liu 等<sup>[12]</sup>还制备了 p 型 QWIP-

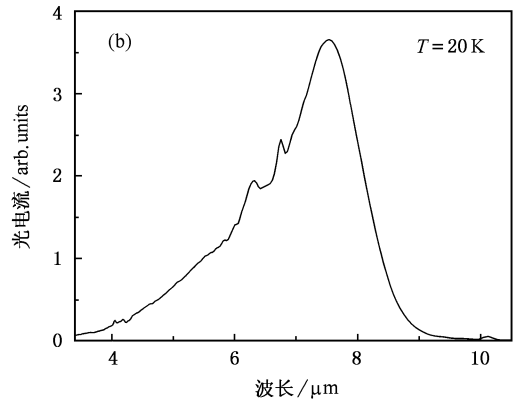
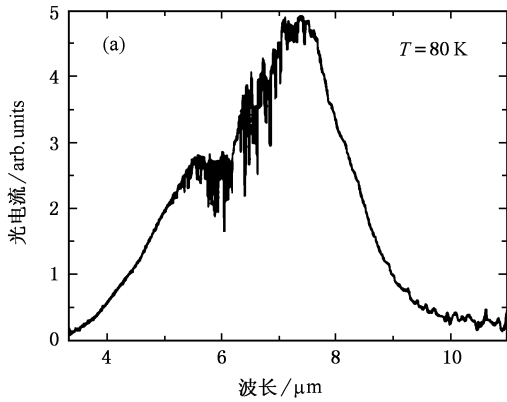


图7 QWIP-LED 中 QWIP 的光电流响应谱 (a)  $T = 80 \text{ K}$  (b)  $T = 20 \text{ K}$

## 4. 结 论

通过自洽计算我们得到了 p 型 QWIP 的光电流谱,与实验结果非常符合.计算结果表明:基态能级不同动量位置的载流子对器件的光电流谱响应的贡

献不相同,所以空穴在动量空间的分布将决定器件的光谱响应峰位.在 p 型 QWIP 中,量子阱中载流子浓度或温度的变化将改变载流子在动量空间的分布,从而使得器件的响应光谱发生变化.这些结果合理地解释了实验中的现象.

献不相同,所以空穴在动量空间的分布将决定器件的光谱响应峰位.在 p 型 QWIP 中,量子阱中载流子浓度或温度的变化将改变载流子在动量空间的分布,从而使得器件的响应光谱发生变化.这些结果合理地解释了实验中的现象.

[1] Smith J S, Chiu L C, Margalit S et al 1983 *J. Vac. Sci. Technol.* B 1 376  
 [2] West L C, Eglash S J 1985 *Appl. Phys. Lett.* 46 1156  
 [3] Choi K K 1997 *The Physics of Quantum Well Infrared Photodetector* (Singapore: World Scientific)  
 [4] Gunapala S D, Bandara K M S V, Levine B F et al 1994 *Appl. Phys. Lett.* 64 3431  
 [5] Li N, Yuan X Z, Li N et al 2000 *Acta Phys. Sin.* 49 797 (in Chinese) 李娜,袁先漳,李娜等 2000 物理学报 49 797

[6] Yuan X Z, Lu W, Li N et al 2003 *Acta Phys. Sin.* 52 503 (in Chinese) 袁先漳,陆卫,李宁等 2003 物理学报 52 503  
 [7] Tang H, Huang K 1987 *Chin. J. Semicon.* 8 1 (in Chinese) 汤蕙,黄昆 1987 半导体学报 8 1  
 [8] Huang K, Xia J B, Zhu B F et al 1988 *J. Lumin.* 40—41 88  
 [9] Chang Y C, James R B 1989 *Phys. Rev. B* 39 12672  
 [10] Szmulowicz F, Brown G J 1995 *Phys. Rev. B* 51 13203  
 [11] Liu H C, Li L, Buchanan M et al 1998 *J. Appl. Phys.* 83 585  
 [12] Allard L B, Liu H C, Buchanan M et al 1997 *Appl. Phys. Lett.*

70 2784

- [ 13 ] Zhen H L 2005 *Ph. D. Dissertation* ( Shanghai Shanghai Institute of Technical Physics , Chinese Academy of Sciences )  
 [ 甄红楼 2005 博士学位论文 ( 上海 :中国科学院上海技术物理研究所 ) ]
- [ 14 ] Zhou X C 2005 *Ph. D. Dissertation* ( Shanghai Shanghai Institute

of Technical Physics , Chinese Academy of Sciences ) ( in Chinese )

- [ 周旭昌 2005 博士学位论文 ( 上海 :中国科学院上海技术物理研究所 ) ]
- [ 15 ] Jiang J , Fu Y , Li N *et al* 2003 *J. Phys. :Condens. Matter* **15** 6311

# The effect of distribution of holes in the momentum-space on the photoresponse of p-type quantum well infrared photodetector<sup>\*</sup>

Zhou Xu-Chang   Chen Xiao-Shuang   Zhen Hong-Lou   Lu Wei

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

( Received 11 July 2005 ; revised manuscript received 28 March 2006 )

## Abstract

The electronic structure and photoresponse of p-type quantum well infrared photodetector ( QWIP ) are calculated by self-consistent method. The effect of distribution of holes in the momentum-space on the photoresponse of the device is studied. The calculation results show that the contribution of holes to the photocurrent depends on the distribution of holes in the momentum-space , so the density of holes and the temperature influence the photoresponse of the p-type QWIP. The theoretical results agree well in the change of photoresponse of device with doping concentration and temperature in the experiment.

**Keywords** : p-type quantum well infrared detector , photoresponse , density of holes , temperature

**PACC** : 7320D , 0762

<sup>\*</sup> Project supported by the Innovative Research Groups of the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 60221502 ) , the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10234040 , 60476040 , 60576068 ) and the State Key Development Program for Basic Research of China ( Grant No. 2001CB610407 ).