

Si/SiGe 量子级联激光器的能带设计*

林桂江¹⁾ 周志文¹⁾ 赖虹凯¹⁾ 李 成¹⁾ 陈松岩¹⁾ 余金中¹⁾²⁾

1) 厦门大学物理系 厦门大学半导体光子学研究中心 厦门 361005)

2) 中国科学院半导体研究所集成光电子国家重点实验室 北京 100083)

(2006 年 9 月 19 日收到 2006 年 11 月 23 日收到修改稿)

详细论述 Si/SiGe 量子级联激光器的工作原理,通过对比找到一组合适的 Si_{1-x}Ge_x 和 SiGe 合金的能带参数,进而应用 6×6 $k \cdot p$ 方法计算了不同阱宽、不同 Ge 组分 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱价带量子化的空穴能级本征值及其色散关系,分析 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱空穴态能级间距随阱宽和组分的变化规律,最后应用计算结果讨论了 Si/SiGe 量子级联激光器有源区的能带设计,有益于优化 Si/SiGe 量子级联激光器结构.

关键词:硅锗材料,量子级联激光器,子带跃迁, $k \cdot p$ 方法

PACC: 7360F, 7320D

1. 引 言

1994 年, Faist 等人研制出波长 4.2 μm 、工作温度 88 K 的激光源,其势阱材料为 GaInAs,势垒材料为 AlInAs,并命名这种激光器为量子级联激光器 (quantum cascade laser, QCL)^[1]. 其工作原理:在有外加电场条件下,利用电子量子隧穿通过一组由耦合量子阱构成的注入区,到达另一组由耦合量子阱构成的有源区,作子带间跃迁而发光,并成为下一级相似结构的注入电子,如此重复上一级的过程,单靠导带中电子多次跃迁实现光发射. 经过十几年的研究, III-V 材料 (GaInAs/AlInAs) QCL 取得巨大的成功,表现在峰值功率超过 1 W、实现室温连续激光运作、激光波长可调等.

III-V 材料 QCL 的基本原理适合于 Si/SiGe 材料系统,然而,由于 Si 与 SiGe 合金的电子亲和势相近,高偏压下异质结的导带带阶对电子几乎不能形成限制,而其价带带阶则比较大 ($\Delta E_v \approx 0.78 \text{ eV} \cdot x$, 其中 x 为合金中 Ge 的组分)^[2]. SiGe 在异质结中容易形成空穴的势阱^[3]. Si/SiGe 材料的子带跃迁发生在 SiGe 量子阱价带的不同空穴态之间,是种 p 型器件,跃迁能量小,适合做成有用的中远红外(覆盖了 THz 波段)光电器件; Si/SiGe 是非极性材料,没有

III-V 材料系的极性光学声子散射,允许在较高温度下运作;更重要的是, SiGe 半导体材料正是近年来人们所寻找的适宜于与 Si 构成异质结器件的一种新型材料, Si/SiGe QCL 的研制,有望在 Si 基光电子器件和光电子集成电路中发挥重要的作用.

Si/SiGe QCL 的研究起步较晚,国内对 Si/SiGe QCL 的研究才刚刚开始,近几年,国外关于这方面的研究在理论和实验上都取得较大的进展^[4-6]. 但是,要实现 Si/SiGe QCL 较大的激光功率和较高温度下的运作,仍有很多问题有待解决,其中最重要的是激光器有源区结构设计的优化. Si/SiGe 量子阱价带不同空穴态之间的辐射跃迁机理有两种,一是子带阱内跃迁 (intra-well transition)^[7],另一种是子带相邻量子阱间跃迁 (interwell transition)^[8]. 子带相邻量子阱之间 HH_1 — LH_1 跃迁 QCL 的设计比较简单,因为同一阱中 HH_1 上占据着大部分的粒子数, HH_1 与相邻量子阱 LH_1 自然地获得粒子数反转,因此可选取只包含 HH_1 , LH_1 两个空穴态的 SiGe 量子阱与 Si 势垒直接构成有源区结构,每个量子阱都是有源区,此时空穴从 HH_1 向 LH_1 跃迁后载流子的重复利用需要通过声子散射来实现,本文作者曾就这种跃迁机理的太赫兹 Si/SiGe 量子级联激光器的能带设计做了一定的研究^[9]. 子带阱内 HH_2 — HH_1 跃迁的 QCL,由于高能态 HH_2 的粒子数比低能态 HH_1 的粒子数少

* 国家自然科学基金 (批准号: 60576001, 60336010), 福建省青年科技人才创新基金 (批准号: 2004J021) 资助的课题.

† E-mail: jzy@red.semi.ac.cn

得多,需要设计复杂的注入区和收集区才可能使得有源区量子阱 HH_2 — HH_1 形成粒子数反转,这种量子级联结构的一个周期通常包含 10 个以上的 Si/SiGe 层,其能带的设计比较复杂,本文将主要讨论量子阱内 HH_2 — HH_1 跃迁 Si/SiGe QCL 的能带设计.

2. 6×6 $k \cdot p$ 方法计算 Si/SiGe/Si 量子阱的价带能级

要了解量子级联结构空穴动力学过程,需要精确计算价带的能带结构.能带结构的 $k \cdot p$ 方法是目前计算半导体价带在极值附近的电子能带结构或电子能谱及其有效质量常用的理论和方法,多带的 $k \cdot p$ 方法通过求解一维 Schrödinger 方程, Poisson 方程,沿着材料生长方向(标志为 z)自洽得到量子阱的子

带能量本征值及能带的色散关系. $k \cdot p$ 方法在计算材料 Γ 点附近的能带结构上是相对准确的, Si/SiGe/Si 量子阱价带主要集中于价带,带阶顶位于 Γ 点.由于本文关注的是 p 型 Si/SiGe 材料系沟道器件,只考虑应变^[10]情况下顶端六个价带能态的相互作用(包含重空穴、轻空穴和自旋轨道耦合相互作用),电子能态只需独立求解单带的 Schrödinger 方程,因此使用 6×6 $k \cdot p$ 方法计算空穴能带结构是足够的.目前 Si_{1-x}Ge_x 合金能带参数的选取没有统一标准,不同的实验测量和理论计算给出的结果有所不同,本文计算中选取的 Si_{1-x}Ge_x 能带参数列于表 1,不同参数的计算结果在最后讨论.对于 Si_{1-x}Ge_x 合金,其 Luttinger 参数与 Si_{1-x}Ge_x 材料的 Luttinger 参数关系由文献 [3] 给出,其余能带参数均由 Si 和 Ge 的相应参数按 Ge 组分 x 做线性插值得到.

表 1 数值计算中用到的材料参数

参数	Si	Ge	部分参考文献
晶格常数 a/nm	0.54304	0.56579	
价带顶 E_v/eV	1.090	1.670	
静压形变势 a_v/eV	2.05	-2.86	[11]
切应变势 b/eV	-2.10	-0.35	[11]
Luttinger 参数 $\gamma_1(\hbar^2/2m_0)$	4.930	14.38	[12]
$\gamma_2(\hbar^2/2m_0)$	0.345	4.24	[13]
$\gamma_3(\hbar^2/2m_0)$	1.427	5.69	[13]
弹性模量 C_{11}/GPa	165.77	128.53	
C_{12}/GPa	63.93	48.26	
C_{44}/GPa	79.62	66.80	
自旋分裂能 Δ/eV	0.044	0.289	

图 1(a)所示为阱宽 $L = 5\text{nm}$ Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si 量子阱空穴态的能量本征值及其波函数平方.由图可见, SiGe 量子阱中限制了五个空穴态,重空穴态 HH_2 , HH_1 , 轻空穴态 LH_1 , LH_2 以及自旋分裂态 SO_1 , 此外,图中显示重空穴 HH_3 已脱离空穴势阱的限制,重空穴态 HH_1 与轻空穴态 LH_1 的能量差约为 56 meV, 重空穴态 HH_2 与重空穴态 HH_1 的能量差约为 94 meV. 使用图 1 中的量子阱结构,计算了阱中限制的五个空穴带的色散关系,如图 1(b)所示,横坐标波矢方向分别从 $[100]$ 方向到布里渊区中心和从布里渊区中心到 $[110]$ 方向,其中 $[100]$ 方向到布里渊区中心

($k = 0$)只取 $k_x = -k_y$, 布里渊区中心($k = 0$)到 $[110]$ 方向的横坐标取 $k_t = \sqrt{(k_x^2 + k_y^2)}$. 由图可见,各能带色散关系表现出了非抛物线性,对于较高的束缚态和较大的 k_t ,能带的非抛物型效应更加明显,且依赖于 k_t 的方向.另外的计算结果还显示对于窄量子阱,能带的非抛物型效应以及量子阱中价带各能级的相互混合特性也更加明显.由此可以计算任意组分任意阱宽的 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱空穴能级的本征能量、波函数及其能带色散关系,它是设计空穴子带跃迁 Si/SiGe 量子级联激光器^[14]的基础.

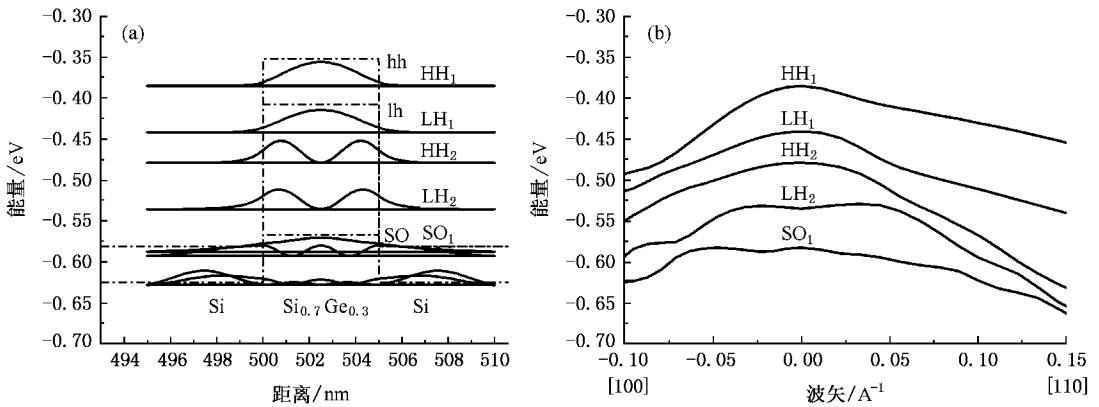


图 1 Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si 量子阱, 阱宽为 5 nm 时 (a) 价带空穴能级本征值及其波函数平方 (b) 空穴能带色散关系

Si/SiGe QCL 的发光主要是在同一 SiGe 量子阱内重空穴 HH₂—HH₁ 之间的空穴跃迁或相邻的 SiGe 量子阱间 HH₁—LH₁ 之间的空穴跃迁, 针对这些有源区 SiGe 量子阱, 本文计算分析了不同 Ge 组分的 SiGe 量子阱 HH₂ 与 HH₁ 的能量差和 LH₁ 与 HH₁ 的能量差随阱宽的变化情况. 如图 2 所示: 在 Ge 含量不变的情况下, HH₂ 与 HH₁ 的能量差随着阱宽的增加而急剧减小, LH₁ 与 HH₁ 的能量差在阱宽小于 3 nm 时, 随阱宽增大而增大, 阱宽大于 3 nm 时, LH₁ 与 HH₁ 的能量差随阱宽变化很小; 在阱宽不变的情

况下, HH₂ 与 HH₁ 的能量差和 LH₁ 与 HH₁ 的能量差均随着 Ge 含量的增加而增大. 图 1 虚线对应于 41 meV (10 THz) 的能量, 由图 2(a) 可见, 当阱宽大于 6 nm 时, 选用合适的 Ge 组分, 利用 HH₂—HH₁ 的空穴跃迁可以获得低于 10 THz 的光发射, 图 2(b) 显示, SiGe 量子阱 HH₁ 与 LH₁ 的能量差则主要依赖于 Ge 组分, 相邻的 SiGe 量子阱间 HH₁—LH₁ 之间的空穴跃迁发射波长主要由偏压电场调制, 为了避免工作电压过高, Ge 组分选取不宜太大.

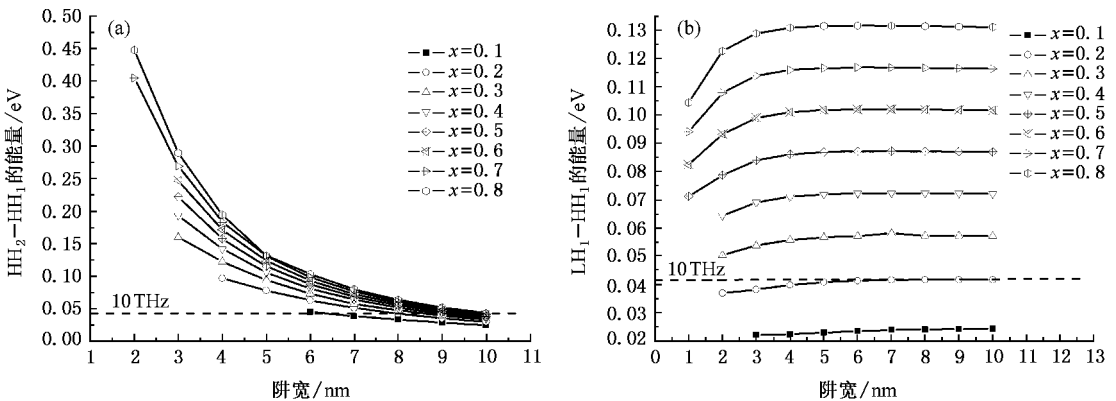


图 2 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱, Ge 组分为 $x = 0.1 \sim 0.8$ 时 (a) 价带空穴能级 HH₂ 与 HH₁ 能量差和 (b) LH₁ 与 HH₁ 能量差随阱宽 L 的变化关系

3. Si/SiGe 量子级联激光器的能带设计

Si/SiGe 量子级联激光器的能带设计就是通过适当地改变量子级联结构中 Si_{1-x}Ge_x 的 Ge 组分 x 、量子阱的宽度 L 来改变量子阱内空穴态间的能级

分布, 通过选取合适的 Si 垒的宽度 d 和外加偏压来改变各量子阱间空穴态的相对能级状态, 以便实现载流子的注入和收集. Si/SiGe 量子阱子带阱内 HH₂—HH₁ 跃迁的 QCL, 注入区的作用是从有源区的一侧注入空穴到 HH₂, 空穴在有源区中从 HH₂ 跃迁到 HH₁ 而发光, 并从另一侧收集空穴以便注入到下一

个有源区,其工作示意图如图 3 所示.在阈值电压下,低能态 HH_1 上的载流子被电压加速隧穿到微带中,这是个快速过程; HH_2 与 HH_1 之间的间距较大,

载流子在 HH_2 态上有较长寿命(> 10 ps),再加上注入区的空穴注入,使得 HH_2-HH_1 形成粒子数反转.

使用 Dehlinger 等实验上的一个 Si/SiGe 量子级

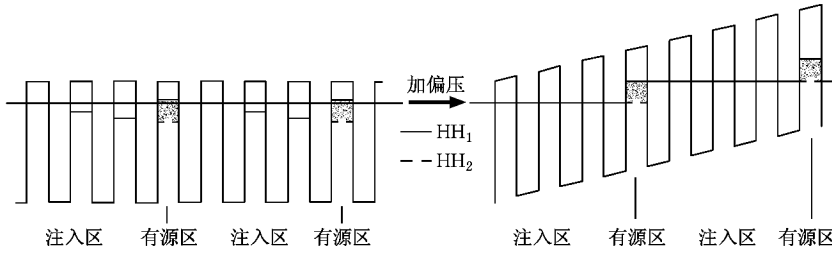


图 3 量子级联激光器(一个周期)未加偏压和偏压工作状态的能带结构示意图

联结构^[15],如图 4 所示,级联结构的每个周期包含五个 SiGe 量子阱,其 Ge 组分和阱宽从左至右分别为 $w_1, 32\%, 4$ nm; $w_2, 32\%, 2.9$ nm; $w_3, 32\%, 2.4$ nm; $w_4, 21\%, 5.7$ nm; $w_5, 21\%, 3.5$ nm. w_1 和 w_5 间的 Si 垒层厚度为 2.6 nm,其余 Si 垒层厚度均为 2.1 nm.图 4 中给出了电场强度为 50 kV/cm 时,该结构价带部分空穴态的能量及其波函数平方,能带计算参数列于表 1.有源区量子阱中 HH_2 与 HH_1 的能量差约为 124.5 meV,与 Dehlinger 等实验上测得的 125 meV 子带光发射峰值能量符合得很好.

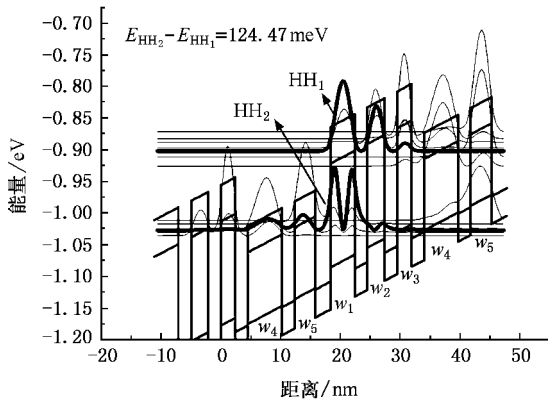


图 4 有源区场强为 50 kV/cm 时,一个 Si/SiGe 量子级联结构价带部分空穴态的能量及其波函数平方

此外,对于如图 4 所示的结构,我们选取部分其他常用的 Si,Ge 的能带参数替换表 1 中相应的参数进行模拟.其中静压形变势 a_v 和切应变势 b 使用 van de Walle 参量^[11]: $a_v(\text{Si}) = 2.46$, $b(\text{Si}) = -2.35$, $a_v(\text{Ge}) = 1.24$, $b(\text{Ge}) = -2.55$;Ge 材料的 Luttinger 参数 $\gamma_{1,2,3}$ ^[10] 分别取为 9.563, 2.772, 3.913, 得到 HH_2 与 HH_1 的能量差约为 118 meV.

4. 讨 论

以空穴为主要载流子的 p 型 Si/SiGe 材料系沟道器件,空穴能带结构的定量计算是理解载流子运输的基础. Si/SiGe 量子阱对空穴态的限制强烈地依赖于量子阱的宽度和 SiGe 合金中 Ge 的组分, Si/SiGe 量子级联激光器的能带设计主要考虑的是 SiGe 量子阱中的三个空穴态 HH_1 , HH_2 和 LH_1 . 我们从众多材料参数中选取一组能带参数列于表 1, 使得计算得到的子带能级差与 Dehlinger 等实验光谱测试结果符合得很好. 应用 6×6 $k \cdot p$ 方法计算 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱空穴能级的本征能量、波函数及其能带色散关系, 可以得到以下结论:

1. 在 Ge 含量不变的情况下, 随着阱宽的增加, SiGe 量子阱中各空穴态能量与 Si 势垒价带带边的能量差越来越大, 阱中能限制的空穴态也越多, 第一轻空穴态 LH_1 与第一重空穴态 HH_1 的能量差 $\Delta E_{LH_1-HH_1}$ 随阱宽的变化不大, 阱宽从 1 nm—10 nm 变化, 各种组分的 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱, $\Delta E_{LH_1-HH_1}$ 变动只有几个 meV, 重空穴 HH_2 与重空穴态 HH_1 的能量差 $\Delta E_{HH_2-HH_1}$ 则随阱宽的增加急剧减小. 当阱宽大于 6 nm 时, 选用合适的 Ge 组分, 可以利用 HH_2-HH_1 的空穴跃迁获得 THz 波段的光发射.

2. 在阱宽不变的情况, 随着 Ge 含量的增加, SiGe 量子阱各空穴态的能量与 Si 势垒价带带边的能量差越来越大, 阱中能限制的空穴态也更多. 第一轻空穴态 LH_1 与第一重空穴态 HH_1 的能量差 ΔE 随 Ge 组分 x 的增加呈现线性递增趋势, 重空穴 HH_2 与重空穴态 HH_1 的能量差 $\Delta E_{HH_2-HH_1}$ 随 Ge 组分

x 的增加而增大.

Si/SiGe 量子级联激光器是 Si 基光源的研制热点,也是难点. 目前报道的关于 Si/SiGe 量子级联结构的研究还不充分,结构设计各不相同,远远没有达到最优化,发光效率和光激励功率都比较低. 本文较准确、定量地计算 Si/SiGe 量子阱空穴能量本征值及

其色散关系,有益于从理论上对 Si/SiGe 量子级联激光器有源区的能带结构进行优化设计,进而寻找结构简单、材料生长难度较小的结构.

感谢 Stefan Birner 提供 nextnano³ 软件^[16],为本文的能带计算提供了有益的帮助.

- [1] Faist J , Capasso F , Sivco D L , Sirtori C , Hutchinson A L , Cho A Y 1994 *Science* **264** 553
- [2] Kasper E 1995 *Properties of strained and relaxed Silicon Germanium (INSPEC)* 125
- [3] Yang H G , Shi Y , Lü J , Pu L , Zhang R , Zheng Y D 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1211(in Chinese) [杨红官、施毅、闫锦、濮林、张荣、郑有 2004 物理学报 **53** 1211]
- [4] Paul D J , Lynch S A , Bates R , Ikonik' Z , Kelsall R W , Harrison P , Norris D J , Liew S L , Gullis A G , Arnone D D , Pidgeon C R , Murzyn , Wells J R , Bradley I V 2003 *Physica E* **16** 309
- [5] Kelsall R W , Ikonik Z , Harrison P et al 2002 *Terahertz Electronics Proceedings , IEEE* 9
- [6] Ikonik' Z , Kelsall R W , Harrison P 2004 *Phys. Rev. B* **69** 235308
- [7] Fischetti M V , Ren Z , Solomon P M , Yang M and Rim K 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 1079
- [8] Bates R , Lynch S A , Paul D J , Ikonik' Z , Kelsall R W , Harrison P , Liew S L , Norris D J , Gullis A G , Tribe W R , Arnone D D 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 4092
- [9] Lin G J , Lai H K , Li Ch , Chen S Y , Yu J Zh 2006 *Chinese Journal of Semiconductors* **27** 916 (in Chinese) [林桂江、赖虹凯、李成、陈松岩、余金中 2006 半导体学报 **27** 916]
- [10] Cheng B W , Yao F , Xue Ch L , Zhang J G , Li Ch B , Mao R W , Zuo Y H , Luo L P , Wang Q M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4350(in Chinese) [成步文、姚飞、薛春来、张建国、李传波、毛容伟、左玉华、罗丽萍、王启明 2005 物理学报 **54** 4350]
- [11] Su H W , Alex Z 1999 *Phys. Rev. B* **60** 5404
- [12] Rieger M M , Vogl P 1993 *Phys. Rev. B* **48** 14276
- [13] Madelung O 1982 *In Tables Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology* (Springer , Heidelberg)
- [14] Ikonik Z , Kelsall R W , Harrison P 2004 *Phys. Rev. B* **69** 235308
- [15] Dehlinger G , Diehl L , Gennser U , Sigg H , Faist J , Ensslin K , Grützmacher D , Müller E 2000 *Science* **290** 2277
- [16] <http://www.wsi.tu-muenchen.de/nextnano3/>

Energy band design for Si/SiGe quantum cascade laser^{*}

Lin Gui-Jiang¹⁾ Zhou Zhi-Wen¹⁾ Lai Hong-Kai¹⁾ Li Cheng¹⁾ Chen Song-Yan¹⁾ Yu Jin-Zhong^{1)†}

¹⁾ Department of Physics, Semiconductor Photonics Research Center, Xiamen University, Xiamen 361005, China

²⁾ State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China

(Received 19 September 2006 ; revised manuscript received 23 November 2006)

Abstract

This paper introduces in detail the working principle of Si/SiGe Quantum cascade laser (QCL). Appropriate parameters are used to calculate the hole subband structure of Si/Si_{1-x}Ge_x quantum well using a six-band $k \cdot p$ method. The dispersion relation and energy band for different layer thickness and compositions are investigated. Meanwhile, the energy separations between hole subbands in Si/Si_{1-x}Ge_x/Si quantum wells are also analyzed. Finally the calculated results are used for the Si/SiGe QCL design, which will be beneficial to the structure optimization of Si/SiGe QCL.

Keywords : SiGe material, quantum cascade laser, intersubband transitions, $k \cdot p$ method

PACC : 7360F, 7320D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60576001, 60336010) and Project of Innovation Foundation of Fujian Province for Younger Scientific Researchers (Grant No. 2004J021).

[†] E-mail : jzyu@red.semi.ac.cn