

P 型张应变 Si/SiGe 量子阱红外探测器的能带设计*

邓和清¹ 林桂江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)

摘要: 提出 p 型张应变 Si/SiGe 量子阱红外探测器(QWIP)结构,应用 $k \cdot p$ 方法计算应变 Si/SiGe 量子阱价带能带结构和应变 SiGe 合金空穴有效质量. 结果表明量子阱中引入张应变使轻重空穴反转,基态为有效质量较小的轻空穴态,因此 p 型张应变 Si/SiGe QWIP 与 n 型 QWIP 相比具有更低的暗电流;而与 p 型压应变或无应变 QWIP 相比光吸收和载流子输运特性具有较好改善. 在此基础上讨论了束缚态到准束缚态子带跃迁型张应变 p-Si/SiGe QWIP 的优化设计.

关键词: 张应变; 锗硅量子阱; 红外探测器;

PACC: 7360F; 7320D

中图分类号: TN215

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2008)04-0785-04

1 引言

量子阱红外探测器(quantum well infrared photo-detector, QWIP)最早于 1987 年由 Levine 等人^[1]用 GaAs/AlGaAs 量子阱作为有源区制成. 由于半导体中的电子有效质量比空穴有效质量小,以电子作为载流子具有较好的红外吸收和输运特性,目前常用的 QWIP 器件通常采用 n 型材料,基于 n 型 QWIP 焦平面阵列制成的成像系统,已应用于国防、工业、医疗等方面,并不断向大面阵、高温、双色或多色方向发展. 但 n 型 QWIP 暗电流偏大,而且根据量子力学跃迁选择定则,它对垂直入射光的吸收是很弱或禁戒的. 这样在量子阱焦平面探测器制备中,需要采用复杂的光栅结构来耦合入射光,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,这一优势引起了人们研究 p 型 QWIP 的热潮. 对于 p 型 QWIP,其量子阱价带的基态一般为重空穴能级,以重空穴作为载流子可以有效减小暗电流;但载流子有效质量大导致较小的吸收系数,这直接影响着红外探测器的响应度. 为解决这一矛盾, Xie 等人^[2]在 1991 年提出用应变来使轻重空穴态反转,以轻空穴为基态,能有效增强子带跃迁的光吸收系数,1993 年 Wang 等人^[3]使用 p 型掺杂的 InGaAs/InAlAs/InP 量子阱,通过在 InGaAs 中引入张应力,使基态转为轻空穴态,制作的 QWIP 在实现低暗电流的同时增强了光吸收.

然而,III-V 族化合物制作的光电器件与已经广泛应用的硅微电子工艺不兼容,不能同硅读出电路实现单片集成. 而 SiGe/Si 材料体系与成熟的硅工艺兼容、成本低. 并且在 Si(001)上生长的 SiGe 量子阱中的势阱主

要落在价带上,垂直方向的子带间吸收已经在 p 型 Si/SiGe 量子阱的价带中观察到^[4,5]. 这类探测器可直接作在 Si-CCD 读出电路上,实现光电子器件的单片集成. 随着 Si 基 SiGe 合金材料生长和器件应用的研究, p 型 Si/SiGe QWIP 将展示出更加诱人的前景.

基于以上分析,本文提出在 p 型 Si/SiGe 量子阱中引入张应变构成 QWIP 结构,并利用 $k \cdot p$ 方法计算应变 Si/SiGe 量子阱价带各空穴能级的本征能量及其波函数平方,分析量子阱空穴能级随阱宽和组分的变化规律,并计算应变 SiGe 合金空穴有效质量,在此基础上设计出满足束缚态到准束缚态型子带跃迁的 p 型张应变 SiGe QWIP 能带结构.

2 应变 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱的能带计算与设计

多带 $k \cdot p$ 方法是目前计算半导体价带在极值附近能带结构及其有效质量常用的理论和方法^[6-8],通过求解一维 Schrödinger 方程、Poisson 方程,自洽计算得到量子阱(IV 族主族材料 Si, Ge, SiGe 和所有 III-V 族主族材料)的子带能量本征值及能带的色散关系,在计算材料 Γ 点附近的能带结构上是相对准确的. 本文关注的是 p 型 Si/SiGe 应变量子阱,只考虑顶端 6 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),因此使用 $6 \times 6 k \cdot p$ 方法计算空穴能带结构是足够的. 本文对应变 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 的能带结构计算是借助 nextnano³ 软件完成的. 计算分两步完成,第一步,使用单带的 Schrödinger 方程计算量子阱结构的势及其准费米能级;第二步,用 $6 \times 6 k \cdot p$ 方法计算量子阱空穴态的本征能量及波函数^[9,10].

* 国家自然科学基金(批准号:50672079,60336010,60676027)和国家重点基础研究发展规划(批准号:2007CB613400)资助项目

† 通信作者. Email: sychen@xmu.edu.cn

2007-09-17 收到,2007-11-11 定稿

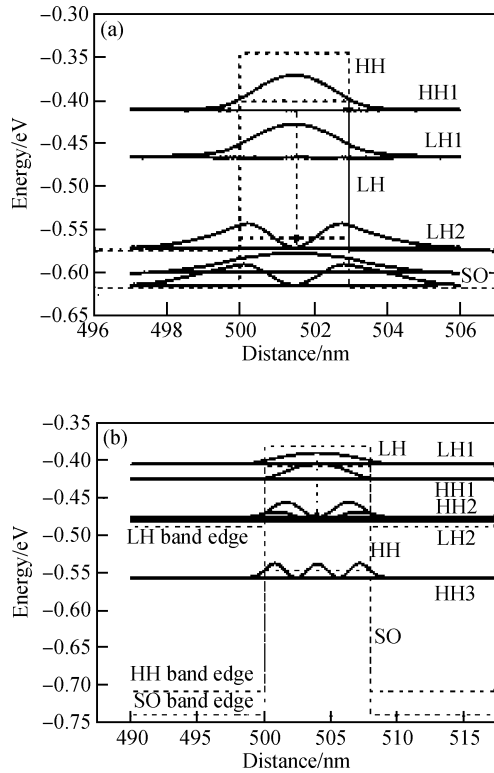


图 1 Si/SiGe/Si 量子阱价带各空穴能量本征值及其波函数平方 (a) 压应变 Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si 量子阱; (b) 张应变 Si/Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 量子阱 虚线为带边, 实线为能量本征值及波函数平方, 带箭头虚线表示束缚态到准束缚态跃迁。

Fig.1 Valence-subband structure of a compressive strained Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si quantum well (a) and a tensile strained Si/Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si quantum well (b) Dotted lines show the band edge, the solid lines show the eigenvalues and wave functions (squared), and the dashed vertical arrows show bound-to-quasi-bound transitions in the quantum well.

计算结果如图 1 所示, 图中给出了应变 SiGe 量子阱重空穴、轻空穴和自旋分裂轨道的带边, 由轻、重空穴所构成的两套子能级的能量本征值及其波函数的平方. 图 1(a) 为 Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si 的能带结构, 阱宽为 3nm, 该结构 SiGe 合金处于压应变, 其基态为重空穴态 HH1. 图 1(b) 为构建在 Si_{0.5}Ge_{0.5} 赝衬底上的张应变 Si/Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 量子阱, 阱宽为 8nm.

可见张应变使得轻/重空穴带边在势阱和势垒中都发生分离, 如图 1(b), 而对于压应变锗硅, 轻/重空穴带边在 Si 势垒中仍是简并的, 如图 1(a) 所示. 而且张应变使轻空穴态上移, 重空穴下移, 轻重空穴发生反转, 基态变为轻空穴 LH1. 对于应变 SiGe 量子阱来说, 有着不同总角动量的子能级之间相互耦合, 使得能量分布呈非抛物线型, 使一般的选择定则不再适用. 在布里渊带的中央, 耦合为零, 只有同一个能级类型的子带跃迁可以发生, 并且两个状态的包络函数奇偶性要相反. 远离布里渊带的中心, 不同能级类型间的跃迁也被允许, 特别是两个包络函数的奇偶性相同的子能级之间也可以发生跃迁. 因此, 图中带箭头虚线所示 HH1-HH2, LH1-LH2 的跃迁都可以发生, 激发态被优化在带边, 满足束

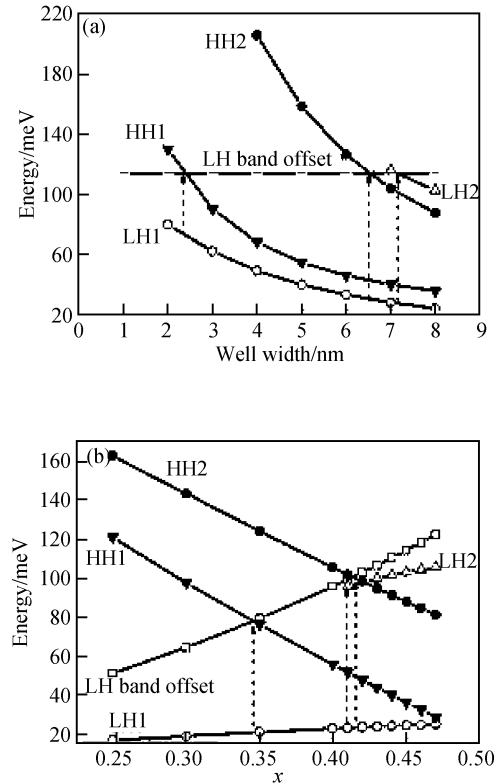


图 2 张应变 Si/SiGe 量子阱空穴能量本征值随阱宽和组分的变化 (a) 构建在 Si_{0.5}Ge_{0.5} 赝衬底上 Si/Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 量子阱空穴能量本征值随阱宽的变化; (b) 构建在 Si_{0.5}Ge_{0.5} 赝衬底上的 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si (0.25 < x < 0.48) 量子阱空穴能量本征值随 Ge 组分的变化 阱宽为 8nm.

Fig.2 Four lowest subband energies and LH band offset versus well width in tensile strained Si/Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si quantum well grown upon a relaxed Si_{0.5}Ge_{0.5} buffer layer (a); (b) Four lowest subband energies and LH band offset versus Ge content x in a 8nm tensile strained Si/Si_{1-x}Ge_x/Si quantum well grown upon a relaxed Si_{0.5}Ge_{0.5} buffer layer Dashed vertical arrows show possible bound-to-quasi-bound transitions in the quantum well.

缚态到准束缚态跃迁型 QWIP 能带优化设计要求。

量子阱中能级位置的确定是获得量子阱红外探测器其他设计参数的基础, 通过调节阱宽、垒宽以及 SiGe 合金中 Ge 的组分等参数, 可调节阱中各子带能级的位置, 从而为 Si/SiGe QWIP 能带的优化设计提供依据. 这里以 Si_{0.5}Ge_{0.5} 为赝衬底, 计算张应变 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱各空穴本征能量随阱宽和组分的变化关系, 能量以 SiGe 势阱轻空穴带边为参考零点, 结果如图 2 所示, 曲线是图示数据点拟合的结果. 图 2(a) 是在 Ge 组分不变的情况下, 随着阱宽的增加, 各空穴能级向着阱底移动, 阱中能限制的空穴态增多; 图 2(b) 给出的是阱宽为 8nm 时, SiGe 量子阱各空穴态能量本征值随 Ge 组分 x 的变化关系. 可见在阱宽不变的情况下, 随着 Ge 含量的增加, 阱中限制的空穴态也增多. 图中带箭头的虚线标示着满足束缚态(基态)到准束缚态型子带跃迁相应的阱宽和组分, 其中 LH-HH (如图 2(a) 中阱宽约为 2.5nm LH1-HH1 和 6.5nm LH1-HH2; 图(b) 组分约为 0.35nm LH1-HH1 和 0.41nm LH1-HH2) 为不同能级类型间的子带跃迁可以吸收正入射光, LH-LH (如图

表 1 数值计算中用到的材料参数

Table 1 Material parameters used for calculation in this paper

参数	单位	Si	Ge
晶格常数 a	nm	0.357	0.357
价带顶 E_v	eV	1.090	1.670
静压形变势 a_v	eV	2.05	-2.86
切应变势 b	eV	-2.10	-0.35
Luttinger 参数 γ_1	$\hbar^2/2m_0$	4.930	14.38
γ_2	$\hbar^2/2m_0$	0.345	4.24
γ_3	$\hbar^2/2m_0$	1.427	5.69
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

(a)中 7nm 左右 LH1-LH2,图(b)组分约为 0.42 LH1-LH2)为同一个能级类型的子带跃迁可吸收非正入射光.

3 应变对 SiGe 合金空穴有效质量的影响

应变是调整半导体能带参数的有效方法之一,在量子阱激光器、调制器、探测器等中有重要的应用.在量子阱中引入应变,可以降低空穴有效质量,加强轻重空穴相互耦合作用,增强 p 型 QWIP 的子带吸收.

本文根据 Chao 等人^[6]给出的推导结果((1)式),求解应变 SiGe 合金带边第一空穴态有效质量.

$$\frac{m_{HH,\perp}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \frac{m_{HH,\parallel}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 + \gamma_2}$$

$$\frac{m_{LH,\perp}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 + 2f_+ \gamma_2}, \frac{m_{LH,\parallel}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 - f_+ \gamma_2} \quad (1)$$

其中 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 为价带的 Luttinger 参数; f_+ 是无量纲的应变依赖因子^[6].

目前, Si, Ge 和 $Si_{1-x}Ge_x$ 合金材料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, Ge 材料参数列于表 1^[9]. 对于 $Si_{1-x}Ge_x$ 合金,其 Luttinger 参数与 Si, Ge 材料的 Luttinger 参数关系由文献[11]给出,其他材料参数均由 Si 和 Ge 的相应参数按 Ge 组分 x 做线性插值得到.

应变 SiGe 合金带边第一空穴态有效质量计算结果如图 3 所示,在 Si(001)上生长的 SiGe 为压应变,基态为重空穴,平行和垂直方向空穴有效质量如图 3(a)所示;在 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ (001) 衬底上的 $SiGe(x < 0.5)$ 为张应变,基态为轻空穴,平行和垂直方向空穴有效质量如图 3(b)所示,其中 m_0 是自由电子质量.

吸收系数可表示为^[12]:

$$\alpha = \rho_s N_T \frac{e^2 \hbar}{4c\epsilon_0 n_r m^*} f \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} \cos^2 \phi \quad (2)$$

其中 ρ_s 是阱中二维空穴气密度,正比于二维空穴态密度^[13]; $D_{2D} = m_{\parallel} / \pi \hbar^2$; m^* 为沿生长方向的有效质量; N_T 为量子阱个数; n_r 为折射率; θ 为入射角; ϕ 为入射电矢量的极化角; f 为跃迁振子强度. 结合(2)式和图 3

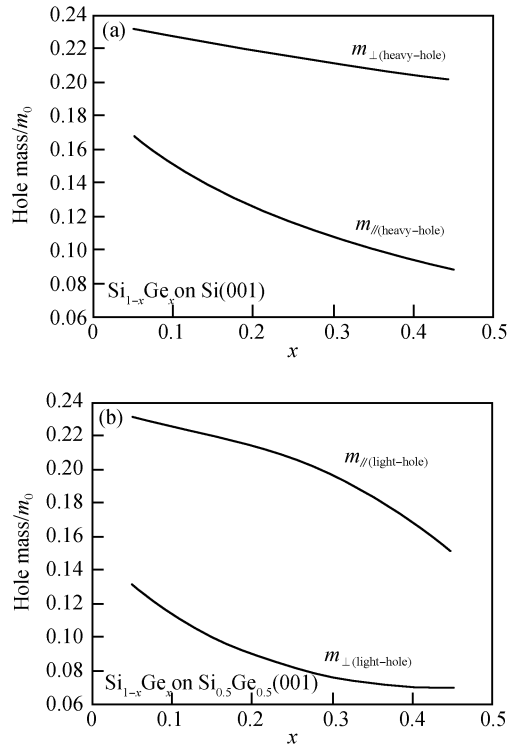


图 3 应变 SiGe 合金带边第一空穴态有效质量同 Ge 组分的关系 (a) 在 Si(001)上生长的 SiGe 合金; (b) 构建在 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ (001) 衬底上的 SiGe 合金 下标 \parallel 和 \perp 分别表示平行和垂直于外延层 xy 平面.

Fig.3 Calculated band-edge masses for the top most valence band in strained $Si_{1-x}Ge_x$ alloys grown upon Si (001) substrates (a) and $Si_{1-x}Ge_x$ alloys grown upon a relaxed $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ (001) substrates (b) Parallel (\parallel) and perpendicular (\perp) to the xy plane

可知,与压应变 SiGe 相比,张应变 SiGe 沿生长方向的有效质量 m_{\perp} 明显变小;平面有效质量 m_{\parallel} 变大,增大态密度,这两者能有效增强光吸收.计算结果表明,p 型 Si/SiGe 量子阱实现了轻、重空穴反转,具有潜在的应用价值.

4 结论

本文提出 p 型张应变 Si/SiGe QWIP 结构,应用 $k \cdot p$ 方法计算应变 Si/SiGe 量子阱价带能带结构和应变 SiGe 合金空穴有效质量.该结构可实现轻重空穴反转,以轻空穴为基态,增强材料的光吸收.并以 $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ 作为衬底,分析了张应变 Si/Si $_{1-x}$ Ge $_x$ /Si 量子阱各空穴本征能量随阱宽和组分的变化关系,给出了具体设计参数,适用于 p 型 Si/SiGe QWIP 的优化设计.

参考文献

[1] Levine B F, Bethea C G, Hasnain G, et al. High-detectivity $D^* = 1.0 \times 10^{10} \text{ cm} (\text{Hz})^{1/2} / \text{W}$ GaAs/AlGaAs multiquantum well $\lambda = 8.3 \mu\text{m}$ infrared detector. Appl Phys Lett, 1988, 53: 296

[2] Xie H, Katz J, Wang W I. Infrared absorption enhancement in light- and heavy-hole inverted $Ga_{1-x}In_xAs/Al_{1-y}In_yAs$ quantum wells. Appl Phys Lett, 1991, 59: 3601

- [3] Wang Y H, Li S S, Chu J, et al. Ultralow dark current p-type strained-layer InGaAs/InAlAs quantum well infrared photodetector with background limited performance for $T \leq 100\text{K}$. *Appl Phys Lett*, 1994, 64: 727
- [4] Park J S, Karunasiri R P G, Wang K L. Normal incidence infrared detector using p-type SiGe/Si multiple quantum wells. *Appl Phys Lett*, 1992, 60: 103
- [5] People R, Bean J C, Bethea C G, et al. Broadband (8-14 μm), normal incidence, pseudomorphic Ge_xSi_{1-x}/Si strained-layer infrared photodetector operating between 20 and 77K. *Appl Phys Lett*, 1992, 61: 1122
- [6] Chao C Y P, Chuang S L. Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells. *Phys Rev B*, 1992, 46(1): 4110
- [7] Ikonc Z, Harrison P, Kelsall R W. Self-consistent energy balance simulations of hole dynamics in SiGe/Si THz quantum cascade structures. *J Appl Phys*, 2004, 96: 6803
- [8] Liu Y X, Ting D Z Y, McGill T C. Efficient, numerically stable multiband $k \cdot p$ treatment of quantum transport in semiconductor heterostructures. *Phys Rev B*, 1996, 54(11): 5675
- [9] Lin Guijiang, Zhou Zhiwen, Lai Hongkai, et al. Energy band design for Si/SiGe quantum cascade laser. *Acta Physica Sinica*, 2007, 56(7): 4137 (in Chinese) [林桂江, 周志文, 赖虹凯, 等. Si/SiGe 量子级联激光器的能带设计. *物理学报*, 2007, 56(7): 4137].
- [10] Lin Guijiang, Lai Hongkai, Li Cheng, et al. Energy band design for terahertz Si/SiGe quantum cascade laser. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2006, 27(5): 916 (in Chinese) [林桂江, 赖虹凯, 李成, 等. 太赫兹 Si/SiGe 量子级联激光器的能带设计. *半导体学报*, 2006, 27(5): 916]
- [11] Rieger M, Vogl P. Electronic-band parameters in strained Si_{1-x}-Ge_x alloys on Si_{1-y}Ge_y substrates. *Phys Rev B*, 1993, 48(19): 14276
- [12] Karunasiri R P G, Park J S, Wang K L. Intersubband absorption in SiGe Si multiple quantum wells. *Appl Phys Lett*, 1990, 57: 2585
- [13] Strong R, Misra R, Greve D W. GeSi infrared detectors I. Absorption in multiple quantum well and heterojunction internal photoemission structures. *J Appl Phys*, 1997, 82: 5191

An Energy Band Design for p-Type Tensile Strained Si/SiGe Quantum Well Infrared Photodetectors*

Deng Heqing¹, Lin Guijiang¹, Lai Hongkai¹, Li Cheng¹, Chen Songyan^{1,†}, and Yu Jinzhong^{1,2}

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

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

Abstract: Quantum well infrared photodetectors (QWIPs) offer numerous potential applications for defense, industry, and medicine. A novel p-type tensile strained Si/SiGe QWIP is proposed in this paper. The valence band structure of the strained Si/SiGe quantum well and hole effective mass of the strained SiGe alloy are calculated using the $k \cdot p$ method. When tensile strain is induced in the quantum wells, the light-hole state with small effective mass becomes the ground state, which is expected to have lower dark current than n-type QWIPs and also have larger absorption coefficient and better transport characteristics than conventional unstrained or compressive strained p-type QWIPs. Designs for p-type tensile strained Si/SiGe QWIP based on the bound-to-quasi-bound transitions are also discussed.

Key words: tensile strained layer; Si/SiGe quantum well; infrared detector

PACC: 7360F; 7320D

Article ID: 0253-4177(2008)04-0785-04

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Nos. 50672079, 60336010, 60676027), and the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2007CB613400)

† Corresponding author. Email: sychen@xmu.edu.cn

Received 17 September 2007, revised manuscript received 11 November 2007

©2008 Chinese Institute of Electronics