

导带的非抛物线性对应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}$ 量子阱红外谱的影响*

杨晓峰¹ 温廷敦¹ 张文栋²

(1 中北大学物理系, 太原 030051)

(2 中北大学电子科学与技术系, 太原 030051)

摘要: 研究了导带非抛物线性对应变 $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}/\text{AlAs}/\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$ 量子阱红外谱的影响. 用 $8 \times 8 \text{ k} \cdot \text{p}$ 理论分析了导带价带混合引起导带的非抛物线性、费米能级变化和带内跃迁吸收峰位置的改变. 数值分析给出与红外吸收实验相一致的结果, 表明导带的非抛物线性对重掺杂量子阱红外谱有显著的影响, 从实验红外谱可以推知导带色散的非抛物线性特征.

关键词: $8 \times 8 \text{ k} \cdot \text{p}$ 模型; 非抛物线性; 红外吸收

PACC: 7320D; 7360N; 2940P

中图分类号: O47

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2005)10-1949-05

1 前言

$\text{k} \cdot \text{p}$ 微扰方法是讨论半导体导带底和价带顶附近能带结构的一种有效而实用的方法^[1]. $\text{k} \cdot \text{p}$ 微扰是 Bardeen 和 Seitz^[2] 提出的一种确定 k 空间高对称点邻近的晶体电子波和有效质量的方法. 后来 Shockley 将此方法推广到包含简并能带的情况^[3], Dresslhaus 等人^[4] 和 Kane^[1] 进一步推广到包含自旋轨道相互作用. 当考虑 III-V 族化合物半导体有效质量方程时, 常把导带底和价带顶的状态一起看成简并态, 采用简并的 $\text{k} \cdot \text{p}$ 微扰方法进行处理, 这样可以讨论导带和价带的耦合即空穴对导带电子的影响. 如果把两个导带态和六个空穴态(两个重空穴态, 两个轻空穴态, 两个自旋轨道分裂态)一起考虑, 形成 $8 \times 8 \text{ k} \cdot \text{p}$ 微扰近似. 仅考虑六个空穴态, 即为 $6 \times 6 \text{ k} \cdot \text{p}$ 微扰近似, 此时要把导带电子看成在有效势阱中运动的单带模型, 电子运动属性由三个方向的有效质量表征, 能量的色散为简单的抛物线型. $8 \times 8 \text{ k} \cdot \text{p}$ 微扰近似由于完整地考虑了导带和价带间态的混合, 最大限度地考虑了能量色散为非抛物

线形状时带来的影响, 尤其在量子阱中存在应变的时候, 带顶的形状偏离抛物线状更明显, 两种计算的差别就更大.

$\text{InGaAs}/\text{AlAs}$ 系列量子阱的理论研究有很重要的实际意义, 因为限制量子阱带内跃迁光探测器工作的一个主要原因是穿透势垒的热电子发射. 抑制这种热电子发射可以通过降低器件的工作温度实现, 但低温将带来体积大、成本高的后果. 另一种选择是通过增大势垒高度来降低热电子发射. 为了得到较大的导带带阶, 往往利用 InGaAs 系列材料带阶的一些特点, 通过增加 In 组分和利用变形势来提升导带带阶. 文献[5]就是对重掺杂量子阱 $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}/\text{AlAs}/\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$ 量子阱红外跃迁谱进行了实验和理论上的研究, 但理论分析出现了一些明显的错误. 为此我们对该样品 Sample1554 重新作了计算. 有别于文献[5], 利用更完整的 $8 \times 8 \text{ k} \cdot \text{p}$ 微扰理论, 考虑应变效应和电荷重新分布的影响, 对导带电子能带做了自洽计算, 结果给出较准确的带内跃迁吸收峰的位置. 与此同时, 发现态的混合引起了导带电子沿垂直生长方向能量色散的非抛物线性, 它较敏感地影响到导带费米能位置, 进而影响了

*国家自然科学基金(批准号:60476063)和山西省自然科学基金(批准号:20041011)资助项目

杨晓峰 男, 1967 年出生, 博士研究生, 副教授, 从事半导体材料光电性质的研究.

2005-02-22 收到, 2005-05-17 定稿

带内跃迁红外吸收特征. 该机制表明, 可以通过实验的带间红外谱来反推导带抛物线性的特征.

2 微扰理论

2.1 基本哈密顿量

闪锌矿结构半导体当不考虑自旋轨道耦合和应变效应时基本哈密顿量可写成:

$$\begin{array}{c|cc|cc|cc}
 & s & s & X & y & z & x & y & z \\
 \hline
 s & & H_{cc} & & & & & & H_{cv} \\
 s & & & & & & & & \\
 \hline
 x & & & & & H_{vv} & & & 0 \\
 y & & & & & & & & \\
 z & & & & & & & & \\
 \hline
 x & & & & & & & & \\
 y & & & & & & & & 0 \\
 z & & & & & & & & H_{vv} \\
 \hline
 & & & & & & & &
 \end{array} \quad (1)$$

$$H_{vv} = \begin{bmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ Nk_x k_z & Nk_y k_z & M(k_x^2 + k_y^2) + Lk_z^2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

其中 L, M, N 为熟知的 Luttinger 参数.

$$H_{cc} = \begin{bmatrix} H_{cc} & 0 \\ 0 & H_{cc} \end{bmatrix} \quad (3)$$

其中 $H_{cc} = H_{cc} = \frac{\hbar^2}{2m_0} s(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} H_{cv}^{sx} + H_{cv}^{sy} + H_{cv}^{sz} & 0 \\ 0 & H_{cv}^{sx} + H_{cv}^{sy} + H_{cv}^{sz} \end{bmatrix} \quad (4)$$

其中 $H_{cv}^{sx} = Bk_y k_z + iPk_x$; $H_{cv}^{sy} = Bk_x k_z + iPk_y$; $H_{cv}^{sz} = Bk_x k_y + iPk_z$

此外还需在 (1) 式的对角项中加入带阶势能项对哈密顿量的贡献. 第 1, 2 项引入 E_c , 第 3~8 项引入 $E_v + \frac{\hbar^2}{2m} k^2$.

$$H_{strain} = \begin{bmatrix} l_{xx} + m(y_y + z_z) & n_{xy} & n_{xz} \\ n_{xy} & m(x_x + z_z) + l_{yy} & n_{yz} \\ n_{xz} & n_{yz} & m(x_x + y_y) + l_{zz} \end{bmatrix} \quad (6)$$

参数 l, m, n 可以通过绝对形变势 a_v 和剪变形变势 b, d 导出:

$$\begin{aligned} l &= a_v + 2b \\ m &= a_v - b \\ n &= \sqrt{3}d \end{aligned} \quad (7)$$

应变效应对导带的影响需要作代换:

$$E_c \rightarrow E_c + \alpha_c \text{tr}(\epsilon) \quad (8)$$

2.3 电子密度和费米能级

波函数取:

$$F_v = \sum_{i=1}^8 u_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (9)$$

2.2 轨道自旋作用和应变效应项

轨道自旋耦合作用项在基 (x, y, z, x, y, z) 下的形式为:

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{3} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

应变对价带的影响需要在 H_{vv} 中添入应变项:

此处基矢为 $u_1 = |s\rangle, u_2 = |s\rangle, u_3 = |p_x\rangle, \dots, u_8 = |p_z\rangle$.

态密度:

$$g(E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \delta(E - E(\mathbf{k})) \quad (10)$$

电子密度:

$$\begin{aligned} n &= \int g(E) f(E) dE \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \sum_{i=1}^8 |u_i|^2 f(E) \end{aligned} \quad (11)$$

与此相对应, 如果电子 k 色散关系为抛物线型, 积分一维势阱电子态密度是熟知的阶梯函数:

$$g(E) = \frac{L_x L_y m^*}{h^2} \sum_i (E - E_i) \quad (12)$$

3 数值计算与讨论

样品 1554 是在 InP 衬底上沿 [100] 方向生长的双垒量子阱结构. 实验测得, 从 120 ~ 360 meV 光谱范围内存在 173, 245 和 275. 5 meV 三个红外吸收峰^[5]. 文献[5]的理论讨论部分存在一些不一致问题, 如计算的 $E_F = 484\text{meV}$ 与讨论时的 E_F 高于 521 meV 的 E_3 能级的矛盾; $E_3 - E_4$ 的能级差 205 meV 与对应跃迁峰的 265 meV 的矛盾等. 为此我们对其束缚态及能带的色散关系作了重新计算, 计算程序是 Nextnano3, 它是种考虑应变效应及电荷的重新分布对带阶影响的自洽算法. 同许多文献一样, 计算中取 InGaAs/AlAs 带阶比为 0.65, 0.35, InGaAs/InAlAs 带阶比为 0.7 ~ 0.3, 该带阶比在众多 InGaAs 双垒量子阱预测到很好的吸收峰值波长. AlAs, GaAs, InAs, $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 形变势和 Luttinger 参数取自文献[6]. $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}$ 的参数用通常方法由 GaAs, InAs 的相应参数混合得到. 图 1 为微扰理论计算的该量子阱中电子在未考虑和考虑了应变效应下, 量子阱结导带势能轮廓及电子束缚态能级. $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ 和 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 材料与 InP 的晶格常数相匹配, 该两层中不存在应变. 而在 AlAs 层中存在 3.5% 张应变, 在 $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}$ 层中存在 2.1% 的压应变. 应变的存在对势阱中的电子束缚态能级产生显著的影响, 此时, 量子阱存在五个束缚态, 它们分别为: $E_1 = 24.1\text{meV}$, $E_2 = 114.8\text{meV}$, $E_3 = 286.4\text{meV}$, $E_4 = 317.4\text{meV}$, $E_5 = 567.7\text{meV}$, 与文献[5]的结果差异很大.

由于样品掺杂浓度较高, 对应高的费米面有助于观察到较高导带能级间的跃迁谱, 并有利于研究导带的非抛物线性色散特征. 图 2 给出应变效应下阱中电子束缚态沿垂直生长方向的色散关系. $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}$ 层掺杂浓度 $n = 8 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 对应势阱中电子面密度 $N_s = 6.4 \times 10^{12}\text{cm}^{-2}$ 取 (11) 式中 $T = 0\text{K}$ 数值积分计算给出费米能级 $E_F = 344\text{meV}$, 图中存在的带内跃迁有 $h_1 = 250.3\text{meV}$, $h_2 = 281.3\text{meV}$, $h_3 = 171.6\text{meV}$, ($h_4 = 90.7\text{meV}$, $h_5 = 31\text{meV}$ 不在观察范围内故略去). 由于 E_3, E_4 能级靠得非常近, 类似简并态, 它们到 E_5 能级的跃迁

图 1 不考虑应变效应(a)和考虑应变效应(b)的量子阱导带电子束缚态能级

Fig. 1 Conduction energy levels in sample 1554 QW (a) without and (b) with strain effect consideration

图 2 势阱中导带电子沿 k 方向色散关系及费米能级 箭头指向为带内跃迁, 虚线为抛物线性色散近似时的费米能级

Fig. 2 Conduction band dispersion along k and Fermi level The solid line for nonparabolic dispersion and the dashed line for parabolic dispersion

振幅也较为接近, 形成较大的吸收峰. 表 1 给出了计算跃迁峰值位置与其他报道中计算值、红外吸收峰实验值的比较, 除去两个不在观测范围的峰外, 对于全部三个吸收峰值位置更好地符合实验数据. $8 \times 8\text{k} \cdot \text{p}$ 的电子存在和空穴的混合, 使得 k 色散偏离抛物线型. 在生长方向 (k_z 方向) 上轻空穴有效质量小于重空穴有效质量, 导带电子有效质量小于轻重空穴有效质量; 而在垂直生长方向 (k 方向) 则相反, 电子的有效质量大于空穴, 轻空穴的大于重空穴的, 电子态中的混合成分使电子色散抛物线趋于陡峭, 故考虑态混合后非抛物线性色散费米面要升高些. 按

照(12)式给出抛物线近似下导带费米能级 $E_F = 305\text{meV}$, 恰好位于 E_4 能级之下, 前边 $h_1 = 250\text{meV}$ 的吸收峰便不存在了. 考虑到红外吸收强度正比于电子占据数 N_i 和跃迁振幅之积, 如以 E_F 为真实费米面, 能级 E_3 上粒子占据数就显著少于以 E_F 为费米面时的占据数, $h_2 = 270\text{meV}$ 的吸收强度也因 E_3 能级占据数的显著降低而减小, 导致明显不同的吸收曲线. 从上面的分析, 红外谱中的两个主要峰 h_1 和 h_2 因为导带的非抛物线性而存在, 和导带形状直接相关. 反过来, 可以通过红外吸收谱和掺杂浓度, 反推导带的非抛物线特征.

表 1 量子阱束缚态能级间可能跃迁、实验吸收峰值及文献值的比较

Table 1 Possible intersubband transitions for this calculation, experimental infrared absorption peaks and the calculations of Ref[5]

本计算	文献值 ^[5]	吸收峰值 ^[5]
90.7 ($E_2 - E_1$)		
171.6 ($E_3 - E_2$)	194	173
250.3 ($E_4 - E_3$)	245	245
31.0 ($E_5 - E_3$)		
281.3 ($E_5 - E_4$)	265 (?)	275.5

4 结论

用 $8 \times 8 \text{ k} \cdot \text{p}$ 对 $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}/\text{AlAs}/\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$ 多量子阱的导带带内跃迁作了分析, 考虑了导带的非抛物线性效应后得到与实验值符合较好

的结果. 分析表明导带的形状直接影响到费米能级的位置和光学跃迁, 尤其是在重掺杂费米能级较高时效果明显. 应变效应和导带电子态与其他空穴态间的混合是导致导带形状偏离抛物线形状的两个重要原因, 一个好的理论计算应该考虑这两种效应. 该结果提示我们, 有别于传统低温高磁场直接测量电子的有效质量和能量色散关系方法, 以红外吸收曲线结合 $\text{k} \cdot \text{p}$ 理论分析的方法也能给出导带电子色散方面的信息, 不失为不同于常规方法的另一种途径.

参考文献

- [1] Kane E O. The $\text{k} \cdot \text{p}$ method. Semiconductors and semimetals. New York: Academic Press, 1996: 75
- [2] Seitz F. The modern theory of solid. New York: McGraw-Hill, 1940: 352
- [3] Shockley W. Energy band structures in semiconductors. Phys Rev, 1950, 78: 173
- [4] Gresselhaus G, Kip A F, Kittel C. Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals. Phys Rev, 1955, 98: 368
- [5] Gupta R, Lai K T, Missous M, et al. Subband nonparabolicity estimated from multiple intersubband absorption in highly doped multiple quantum wells. Phys Rev B, 2004, 69: 033303
- [6] Vurgaftman J R, Meyer L R, Ram-Mohan, Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. J Appl Phys, 2001, 89(11): 5815

Influences of Conduction Band Nonparabolicity on Infrared Absorption in Strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{AlAs}$ Quantum Wells *

Yang Xiaofeng¹, Wen Tingdun¹, and Zhang Wendong²

(1 *Physics Department, North University of China, Taiyuan 030051, China*)

(2 *Department of Electronic Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China*)

Abstract : The infrared absorption of strained $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}/\text{AlAs}/\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{As}$ quantum well dependence on the conduction band nonparabolicity is studied within the framework of the 8×8 $k \cdot p$ model. The conduction state mixes with the valence state leads to the nonparabolicity of conduction band dispersion, which consequently changes the fermi level and affects the intersub-band transitions. This numerical analysis accords quantitatively with the experimental data. The result shows that the nonparabolicity of conduction bands has a significant effect on the infrared spectrum in heavily doped quantum wells and alternatively the infrared spectrum could be used to infer the features of the conduction band nonparabolicity.

Key words : 8×8 $k \cdot p$ model; nonparabolicity; infrared absorption

PACC : 7320D; 7360N; 2940P

Article ID : 0253-4177(2005)10-1949-05

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 60476063) and the Natural Science Foundation of Shanxi Province (No. 20041011)

Yang Xiaofeng male, was born in 1967, PhD candidate, associated professor. He is engaged in research on semiconductor optical and electronic properties.

Received 22 February 2005, revised manuscript received 17 May 2005

© 2005 Chinese Institute of Electronics