

太赫兹 Si/ SiGe 量子级联激光器的能带设计*

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: 使用 nextnano³ 模拟软件计算 Si/ Si_{1-x}Ge_x/ Si 量子阱的能带结构, 对 Si/ SiGe 量子级联激光器有源区的能带结构进行设计, 结果表明使用 Ge 组分为 0.27 ~ 0.3, 量子阱宽度为 3nm 的 SiGe 合金与垒宽为 3nm 的 Si 层构成对称应变级联异质结构, 有利于优化 THz Si/ SiGe 量子级联激光器结构。

关键词: Si/ SiGe; 量子级联激光器; 子带阱间跃迁; nextnano³

PACC: 7360F; 4255; 7320D

中图分类号: TN304 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2006)05-0916-05

1 引言

量子级联激光器 (quantum cascade laser, QCL) 最早于 1994 年由美国 Bell 实验室的 Faist 等人在 III-V 族材料 (GaInAs/ AlInAs) 中实现^[1]. 它是在有外加电场条件下单靠一种载流子的多次子带间跃迁发光而实现的. 由于受到天然 Si 材料间接能带结构的限制, Si 材料的发光效率极低, 更谈不上实现受激光发射. SiGe 半导体材料是近年来人们所寻找的适宜与 Si 构成异质结器件的一种新型材料, 使用 SiGe 合金的 Si/ SiGe 量子级联异质结构子带受激光发射已被实验证实^[2].

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有效限制, 价带带阶则比较大 ($E_v \approx 0.78\text{eV} \cdot x$, 其中 x 为合金中 Ge 的组分)^[3], SiGe 在异质结中容易形成空穴的势阱, Si/ SiGe 材料的子带跃迁发生在 SiGe 量子阱价带不同空穴态之间, 载流子跃迁机制有两种, 一种是子带阱内跃迁 (intra-well transition)^[2]; 另一种是子带相邻量子阱间跃迁 (interwell transition)^[4]. 与 III-V 族材料 QCL 相比, Si/ SiGe QCL 是一种 p 型器件, 载流子跃迁能量小, 适合做中、远红外光电子器件, 子带相邻量子阱间空穴态的跃迁能量由外偏压调制, 覆盖了太赫兹 (0.1 ~ 10 THz) 波段. 利用太赫兹光源和光谱系统可以得到材料在其他波段上不具有的信息, 具有广泛的应用前景, 包括半导体材料、高温超导材料的性质研究、断层成像技术、无标记的基因检查、细胞水平的成像以及化学和生物的

检测等^[5].

2 Si/ SiGe/ Si 量子阱的能带计算

SiGe 固溶体是由硅和锗形成的溶解度无限的替位固溶体, 又称 SiGe 合金, 可以通过改变 Ge 的组分及膜应变的方法来调整材料的禁带宽度, 同 Si 和 Ge 一样, Si_{1-x}Ge_x 合金也是间接带隙半导体, 当 Ge 组分 x 小于 0.85 时, Si_{1-x}Ge_x 合金材料的能带为类 Si 结构, 导带极小值位于 X 附近的 Γ 带谷, 考虑到 Ge 的引入会在 Si/ SiGe 界面产生应变, 应变随着 Ge 组分的增大而增大, Si 上生长 SiGe 材料的共度生长临界厚度也会变小, 因此, 用于构造 QCL 的 SiGe 合金的 Ge 组分 x 一般小于 0.85, 此时 Si_{1-x}Ge_x 合金材料的能带类 Si.

以下关于 Si/ SiGe/ Si 的能带结构计算是由 nextnano³ 来完成, nextnano³ 是一种 3D 纳米器件模拟器, 用量子力学方法 (Schrödinger 方程, Poisson 方程和电流连续性方程), 通过自洽计算研究纳米半导体器件 (III-V 族主族材料 Si, Ge, SiGe 和所有的 III-V 族主族材料) 的电子和光学特性. 为简化, 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, 读进相关数据用 $6 \times 6 \text{ k} \cdot \text{p}$ 方法计算量子阱空穴态的本征能量及波函数.

图 1 为 Si/ Si_{0.7}Ge_{0.3}/ Si 的能带结构示意图, 3nm 宽的 Si_{0.7}Ge_{0.3} 量子阱介于 500 ~ 503nm 之间, 偏压为 10V/cm, 材料构置在赝晶 Si [100] 上. 导带中给出了 Gamma 带、L 带和 X 带, 量子阱导带底位

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

†通信作者. Email: xiaoxi1201@163.com

2005-08-19 收到, 2005-10-17 定稿

于带谷(图中未标出),位于 X 点附近,其能量略小于 X 带.在应变区域, X 分裂为 X1 和 X2. 价带顶轻、重空穴劈裂,劈裂大小由应变大小决定,图中分别画出了重空穴、轻空穴和自旋分裂轨道的带边,它们在 Si_{0.7}Ge_{0.3} 中形成空穴的势阱.量子阱空穴态的能量本征值及其波函数的平方如图 2 所示.由图可见,阱宽为 3nm 的 Si_{0.7}Ge_{0.3} 量子阱中限制了三个空穴态,即重空穴态 HH2, HH1 和轻空穴态 LH1,其中重空穴 HH2 在高偏压下脱离空穴势阱的限制,重空穴态 HH1 与轻空穴态 LH1 的能量差约为 53meV,重空穴态 HH2 与重空穴态 HH1 的能量差约为 159meV.

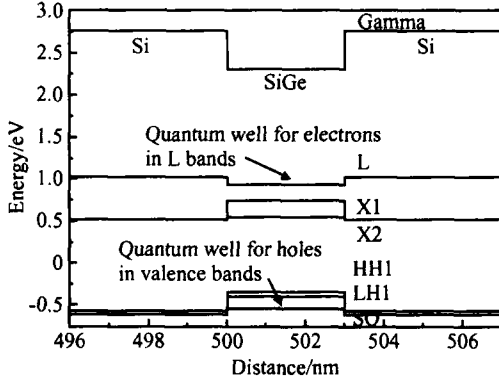


图 1 Si/ Si_{0.7}Ge_{0.3}/ Si 量子阱(阱宽为 3nm)的导带和价带能带结构
Fig. 1 Conduction and valence bands for Si/ Si_{0.7}Ge_{0.3}/ Si quantum well well width = 3nm

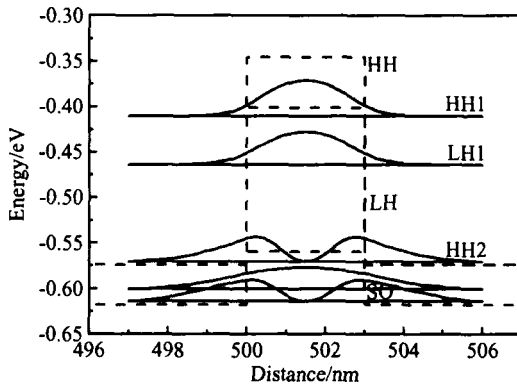


图 2 Si/ Si_{0.7}Ge_{0.3}/ Si 量子阱(阱宽为 3nm)价带空穴能级能量及其波函数平方
Fig. 2 Energies and wavefunctions (squared) of confined states for Si/ Si_{0.7}Ge_{0.3}/ Si quantum well well width = 3nm

利用 nextnano³ 可以计算任意组分、任意阱宽的 Si/ SiGe/ Si 量子阱能带结构,它为 Si/ SiGe QCL 的能带设计提供依据.图 3 给出了 Si_{0.7}Ge_{0.3} 量子阱各空穴态能量值随阱宽的变化关系(与参考文献[6]的计算结果一致),能量以 Si 势垒重(轻)空穴带边

为参考零点,在 Ge 含量不变的情况下,随着阱宽的增加,各空穴态的能量与 Si 势垒能量差越来越大,阱中能限制的空穴态也越多;当阱宽大于 7nm 时,重空穴 HH2 的能量开始低于 LH1 的能量.

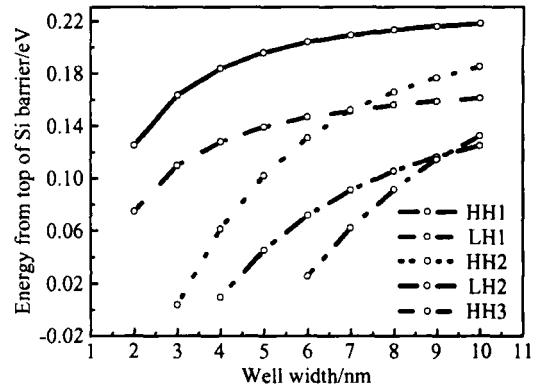


图 3 外偏压为 10V/cm 时 Si/ Si_{0.7}Ge_{0.3}/ Si 量子阱所限制空穴态的能量本征值随量子阱宽度的变化关系
Fig. 3 Variation of eigenenergies of confined states in a Si/ Si_{0.7}Ge_{0.3}/ Si quantum well versus well width for 10V/cm applied electric field

图 4 给出的是阱宽为 3nm 的 Si_{1-x}Ge_x 量子阱在 10V/cm 的偏压下各空穴态能量值随阱宽 Ge 组分 x 的变化关系.在阱宽不变的情况下,随着 Ge 含量的增加,各空穴态的能量与 Si 势垒的能量差越来越大,阱中能限制的空穴态也更多,由于 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 HH1-LH1 之间的空穴跃迁,图 3、图 4 中没有给出高于 HH3 的空穴态,曲线是由图示数据点拟合的结果.

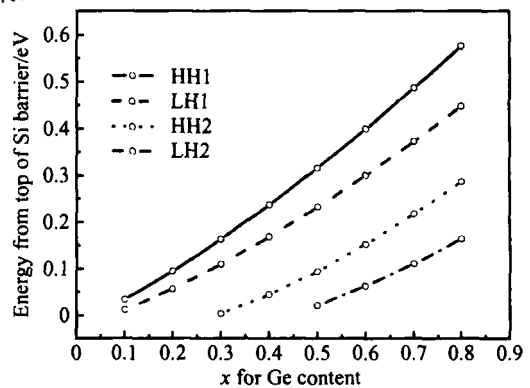


图 4 外偏压为 10V/cm 时 Si/ Si_{1-x}Ge_x/ Si(阱宽为 3nm)量子阱所限制空穴态的能量本征值随 Ge 组分 x 的变化关系
Fig. 4 Variation of eigenenergies of confined states in a Si/ Si_{1-x}Ge_x/ Si quantum well (well width = 3nm) versus Ge content for 10V/cm applied electric field

Si/ SiGe 的 QCL 一般包含有大量的周期结构,它们的波函数通常(或大部分)被限制在单周期的结

构内,对于长的级联结构,波函数近似周期性,即可以根据电压降简单地实现波函数在各个周期的平移,简化计算过程.

3 THz Si/SiGe QCL 的能带设计

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.子带阱内 HH2-HH1 跃迁的 QCL 中,这种跃迁机制称为垂直跃迁,需要设计复杂的注入区才可能使得 HH2-HH1 形成粒子数反转而产生光激射.此外 HH2-HH1 的能量差一般较大,对于如图 2 所示的 Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si 量子阱约为 159meV,对应频率为 38.5THz,超出了太赫兹波段.相邻阱间 HH1-LH1 对角跃迁 QCL 的设计则比较简单,选择只包含 HH1,LH1 两个空穴态 QCL 的设计选用 SiGe 合金 Ge 组分可以较小,量子阱宽度也较小,能有效缓解 Si/SiGe 材料生长中由于应变失配所带来的难题;同一量子阱阱内 HH1 和 LH1 间的跃迁在零偏压下是禁戒的,即使考虑到空穴态的各向异性,其跃迁几率也不大;而相邻阱间空穴态波函数的奇偶性没有任何关联,它们之间的跃迁不受限制;同一阱中低能态的 HH1 上占据着超过 90%的空穴,HH1 与相邻阱内的 LH1 之间较容易获得粒子数反转,可获得较大光学跃迁几率.当然,HH1-LH1 的空穴跃迁必然造成 HH1 态空穴的减少和 LH1 态空穴的累积,为了将 LH1 上重空穴的积累及时转移到低能态 HH1 上,同一量子阱中 HH1 和 LH1 能量差的设计要有利于增强空穴-声子的相互作用,即 HH1 和 LH1 的能量差要等于或大于相应的 SiGe 合金晶格振动能量(各种模式光学声子或声学声子能量中的一种),使得两个低能态子带(HH1 和 LH1)散射时间较少,并且通过声子散射实现空穴的转移和重复利用.实现这种效果的量子级联结构其

对角跃迁发射波长(或跃迁能量)可通过偏压电场得到调制,每个量子阱都是有源区,可以使预期的激发功率更大.

由 Si/SiGe 量子阱能带的计算结果结合以上分析可以对 THz Si/SiGe QCL 的能带结构进行较合理的设计,综合考虑以下三点:

(1)由图 3、图 4 的数据曲线得出,Ge 组分 x 小于 0.3、量子阱宽度 L 小于 3nm 时的 SiGe 量子阱只限制 HH1,LH1 两个空穴态.

(2)量子级联激光器工作在高偏压下,为了保证足够大的价带带阶对 HH1,LH1 两个空穴态形成有效限制,Ge 组分和量子阱宽度均不能太小.

(3)SiGe 合金是非极性材料,空穴与声子的相互作用机制主要是形变势散射,为了将 LH 上重空穴的积累通过声子散射转移到低能态 HH1 上,SiGe 量子阱中 HH1 和 LH1 的能量差要等于或大于相应的 SiGe 合金晶格振动能量^[7].表 1 给出了以下三组数据:SiGe 量子阱中 Ge 含量为 0.3,量子阱宽度为 1~5nm 时 LH1 与 HH1 的能量差;SiGe 量子阱中阱宽为 3nm,Ge 组分为 0.1~0.5 时 LH1 与 HH1 的能量差;Si,Ge 和 SiGe 合金光学声子能量^[7,8].由表 1 可以看出,SiGe 量子阱中 LH1 与 HH1 的能量差主要由 Ge 组分决定,并随 Ge 组分的增加单调递增,对于阱宽为 3nm 的 SiGe 量子阱,阱中 LH1 与 HH1 的能量差拟合后有如下线性关系(单位:meV):

$$E_{LH1-HH1} = 7.762 + 151.832x (0.1 < x < 0.8) \quad (1)$$

SiGe 合金光学声子能量随 Ge 组分变化的改变量很小,如表 1 所示^[6,7],光学声子能量约为 49meV,由(1)式取 $x = 0.27$,得到阱宽为 3nm 时的 Si/Si_{0.73}Ge_{0.27} 量子阱中, $E_{LH1-HH1} = 49$ meV,价带带阶 $E_v = 205$ meV,LH1 与 Si 势垒重(轻)空穴带边的能量差值为 93meV,空穴势阱在高偏压下仍足以限制住 HH1 和 LH1 两个空穴态.

表 1 Si/Si_{1-x}Ge_x/Si 量子阱所限制空穴态的能量差和 Si_{1-x}Ge_x 合金光学声子能量

Table 1 Separations in energy of confined states in a Si/Si_{1-x}Ge_x/Si quantum well and optical phonon energies in Si_{1-x}Ge_x alloy

Well width, $x=0.3$ (见 Fig. 3)	1nm	2nm	3nm	4nm	5nm	Phonon energy	Si _{1-x} Ge _x alloy
$E_{LH1-HH1}$ /meV	—	50.42	53.75	55.75	56.68	TO _{Si-Si} /meV	60
Ge content, $L=3$ nm(见 Fig. 4)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	TO _{Ge-Ge} /meV	36
$E_{LH1-HH1}$ /meV	22.15	38.20	53.75	68.95	84.07	TO _{Si-Ge} /meV	49~50(0 < x < 1)

由以上分析,我们取多量子阱 Si/Si_{0.73}Ge_{0.27}/Si 作为 THz Si/SiGe QCL 的有源区,每层 Si 和 Si_{0.73}Ge_{0.27} 的厚度均为 3nm.图 5 所示为一个 Si/Si_{0.73}Ge_{0.27}/Si 量子级联结构有源区价带的能带结构及各量子阱中空穴态能量本征值和波函数平方,由图可

见,当有源区电场强度很小时(field = 10V/cm),相邻量子阱中空穴态的波函数相互耦合.逐渐加大偏压,直至有源区两个相邻量子阱间的压降大于阱中 LH1 和 HH1 的能量差 $E_{LH1-HH1}$.如图 6 所示,有源区电场强度为 102kV/cm,量子阱中 $E_{LH1-HH1}$ 约为

49meV,相邻量子阱中 HH1 和 LH1 能量差约为 12meV,实线箭头表示空穴跃迁过程,与其对应的可能发射波长为 103 μ m,频率为 2.9THz,发射波长可以由外加偏压调制,虚线箭头表示阱内空穴从 LH1 向 HH1 弛豫.为了保证各量子阱发射波长一致,有源区场强分别要均匀,因此要求有源区材料均匀,整个级联结构对于有源区对称.

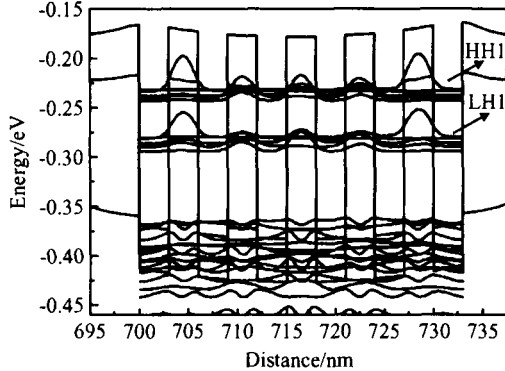


图 5 有源区场强为 10V/cm 时 Si/ Si_{0.73}Ge_{0.27}/ Si 量子级联结构价带空穴态的能量及其波函数平方

Fig. 5 Calculated energies and wavefunctions (squared) of hole states in Si/ Si_{0.73}Ge_{0.27}/ Si quantum cascade structure field = 10V/cm

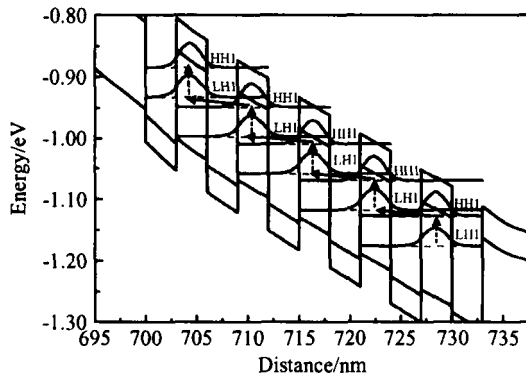


图 6 有源区场强为 102kV/cm 时 Si/ Si_{0.73}Ge_{0.27}/ Si 量子级联结构价带空穴态的能量及其波函数平方

Fig. 6 Calculated energies and wavefunctions (squared) of hole states in Si/ Si_{0.73}Ge_{0.27}/ Si quantum cascade structure field = 102kV/cm

4 结语

在理论上 Si/ SiGe 量子级联激光器超越了 Si 基材料间接带隙特性对载流子带间复合发光的限制,成为最有希望实现的 Si 基光源,且其发射波长

处于中、远红外波段,覆盖了 THz 波段.此外, Si/ SiGe 激光器完全与成熟的 Si 基微电子工艺兼容.目前报道的关于 Si/ SiGe 量子级联结构的研究还不充分,从这几年来 Si/ SiGe QCL 的研究来看,要实现较大的激射功率和较高温度的运作,仍有很多问题有待解决,其中最重要的就是激光器有源区的结构优化.本文从 Si/ SiGe 量子级联激光器有源区的能带结构设计出发,寻找设计简单、材料生长难度较小的结构.通过能带计算分析发现,使用 Ge 组分为 0.27 ~ 0.3,量子阱宽度为 3nm 的 SiGe 合金与 Si 构成级联异质结构,量子阱中 LH1 和 HH1 的能量差等于或略大于相应的 SiGe 合金晶格振动能量,适合制作成为子带相邻量子阱间跃迁 THz Si/ SiGe QCL 有源区材料.

参考文献

- [1] Faist J, Capssso F, Sivco D L, et al. Quantum cascade laser. Science, 1994, 264(22) :553
- [2] Diehl L, Dehlinger G, Sigg H, et al. Intersubband quantum cascades in the Si/ SiGe material system. Physica E, 2002, 13: 829
- [3] Kasper E. Properties of strained and relaxed silicon germanium. INSPEC, 1995
- [4] Bates R, Lynch S A, Paul D J. Interwell intersubband electroluminescence from Si/ SiGe quantum cascade emitters. Appl Phys Lett, 2003, 83:4092
- [5] Bradley Ferguson, Zhang Xicheng. Materials for terahertz science and technology. Physics, 2003, 5:286 (in Chinese) [Bradley Ferguson, 张希成. 太赫兹科学与技术研究回顾. 物理, 2003, 5:286]
- [6] Kolodzey J, Adam T N, Troeger R T, et al. The design and operation of terahertz sources based on silicon germanium alloys. Silicon Monolithic Integrated Circuits in RF Systems, Digest of Papers, Topical Meeting, 2003:1
- [7] Reimann K, Kaindl R A, Woerner M. Optical deformation-potential scattering of holes in multiple quantum well structures. Phys Rev B, 2001, 65:045302
- [8] Weber J, Alonso M I. Near-band-gap photoluminescence of SiGe alloys. Phys Rev B, 1989, 40:5683
- [9] Paul D J, Lynch S A, Bates R, et al. Electroluminescence from Si/ SiGe quantum cascade emitters. Physica E, 2003, 16:309
- [10] Paul D J, Lynch S A, Bates R, et al. Si/ SiGe quantum cascade emitters for terahertz applications. Physica E, 2003, 16:147
- [11] Ikonic Z, Kelsall R W, Harrison P. Monte Carlo simulations of hole dynamics in SiGe/ Si terahertz quantum cascade structures. Phys Rev B, 2004, 69:235308
- [12] Kelsall R W, et al. Silicon germanium quantum cascade heterostructures for infra-red emission. International Conference on Group Photonics, 1st IEEE, HONG KONG, 2004

Energy Band Design for a Terahertz Si/ SiGe Quantum Cascade Laser^{*}

Lin Guijiang^{1,†}, Lai Hongkai¹, Li Cheng¹, Chen Songyan¹, and Yu Jinzhong^{1,2}

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

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

Abstract: The eigenenergies of confined states in Si/ SiGe/ Si quantum wells are calculated with nextnano³ software for the design of terahertz Si/ SiGe QCLs. The results indicate that the structure of the Si/ SiGe quantum cascade may be optimized by using a strain-symmetric heterostructure consisting of a Si_{1-x}Ge_x (0.27 < x < 0.3) well with a width of 3nm and a Si barrier with a width of 3nm.

Key words: Si/ SiGe; quantum cascade laser; intersubband interwell transitions; nextnano³

PACC: 7360F; 4255; 7320D

Article ID: 0253-4177(2006)05-0916-05

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

[†]Corresponding author. Email: xiaoxi1201@163.com

Received 19 August 2005, revised manuscript received 17 October 2005

©2006 Chinese Institute of Electronics