

锗硅量子阱结构带间吸收边研究

黄仕华

(浙江师范大学物理系, 浙江金华 321004)

摘要 利用光电流谱的方法对锗硅量子阱结构的带间吸收边进行了研究. 实验观察到了在不同的偏压和温度下, 锗硅量子阱结构的带间吸收边谱线发生了有规律的变化. 通过对锗硅量子阱材料的光电流谱的带间跃迁吸收边的拟合, 得到了硅导带到锗价带的能带宽度分别为 1.043 eV 和 1.050 eV. 随着外加电场的增强, 带边的吸收曲线向低能方向移动. 通过理论计算得到了带间跃迁吸收边的漂移量与外加电场的关系, 并与实验吻合较好. 随着温度的降低, 带间吸收边向高能方向偏移, 对于这一现象给出了定性的解释, 并通过拟合得到了禁带宽度随温度的变化率.

关键词 锗硅量子阱; 光电流谱; 带间吸收边; 外加电场

中图分类号 TN312; TN248

文献标识码 A

0 引言

锗硅量子阱结构是近几年来低维凝聚态物理研究的热点, 因为这种材料不仅是低维半导体物理基础研究的重要对象之一, 而且由于它与发展成熟的硅工艺具有较好的兼容性从而具有诱人的应用前景. 人们利用导纳谱^[1,2]、深能级瞬态谱^[3,4]、C-V 法^[5,6]、电导法(G-V)^[7]、光电流吸收谱^[8]、光致发光谱^[9]等电学方法对锗硅低维结构的量子能级结构和库仑荷电效应、载流子俘获过程和量子阱的能带偏移、带内吸收、量子能级之间的跃迁等光电特性进行了研究^[10~12], 但是, 对锗硅量子阱结构的价带到导带的带间吸收边的研究却不多.

本文利用光电流谱的方法对锗硅量子阱结构的带间吸收边进行了研究. 在实验上观察到了在不同的偏压和温度下, 锗硅量子阱结构的带间吸收边的谱线发生了有规律的变化. 通过理论计算, 对这种现象进行了合理的解释.

1 实验

本文中的量子点样品 A 是在 p 型 Si(100) 单晶衬底上用分子束外延的方法生长的. 首先在衬底温度为 600°C 时生长一层厚度为 50 nm 的 Si 缓冲层, 然后交替生长 3 个周期的 50 nm 的 Ge 量子点层和 50 nm 的 Si 间隔层, 最后覆盖一层约 100 nm 的 Si. 量子阱样品也是采用分子束外延方法生长的, 样品 B 是在的 p 型 Si(100) 衬底上生长厚度为 100 nm 的 Si 缓冲层, 然后交替生长 2 个周期约 50 nm 厚的 Ge_{0.2}Si_{0.8} 量子阱层和 100 nm 的 Si 间隔层, 最后覆

盖一层 100 nm 的 Si. 样品 C 的量子阱层为 Ge_{0.5}Si_{0.5}, 其余的生长参量与样品 B 完全相同.

碘钨灯为光源. 光从单色仪分光后, 出射的单色光经过两个透镜聚焦照射到样品上, 产生的光电流信号通过探针引进锁相放大器, 通过计算机对单色仪和锁相放大器进行控制、数据采集和数据处理.

为了能进行光电流的测量, 样品的正面蒸铝形成肖特基接触, 背面蒸铝并合金化形成欧姆接触. 样品放置在低温箱中, 温度可以从 77 K 至 300 K 连续可调, 样品两端可以加连续可调的反向偏压. 此测试系统的能量分辨率约为 0.5 meV.

2 结果与讨论

图 1、图 2 分别为量子点样品 A 和量子阱样品 B 及 C 在温度为 300 K 及不同反向偏压下光吸收边附近的吸收曲线. 从两个图中都可以看出随着偏压(电场)的增强, 吸收曲线明显地向低能方向漂移. 锗、硅的从价带到导带的带间跃迁为间接跃迁, 在导带和价带为抛物线型的近似下, 由带间跃迁引起的

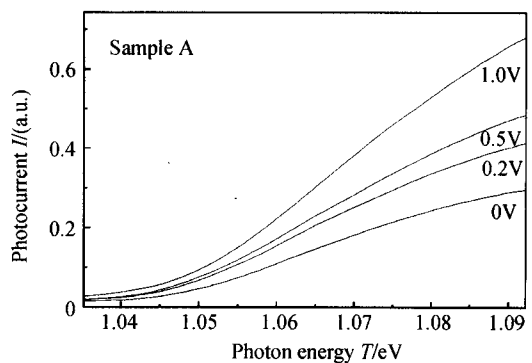


图 1 样品 A 在温度为 300K 及不同反向偏压下光吸收边附近的吸收曲线

Fig. 1 The absorption curves of sample A under different reversed voltage at 300 K

* 浙江省自然科学基金(Y404363)资助

Tel: 0579-2298929 Email: huangshihua@zjnu.cn

收稿日期: 2005-07-15

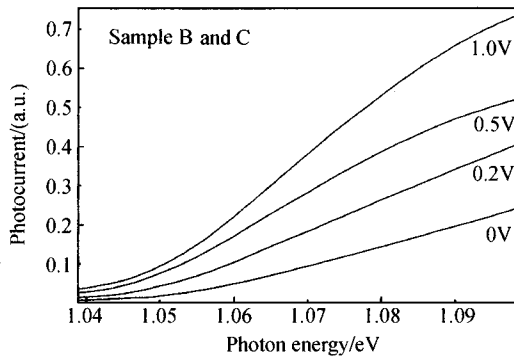


图 2 样品 B 及 C 在温度为 300 K 及不同反向偏压下光吸收边附近的吸收曲线
Fig. 2 The absorption curves of sample B and C under different reversed voltage at 300 K

间接吸收系数近似为^[13]

$$\alpha \propto (h\omega - E_g)^2 \quad (1)$$

式中 $h\omega$ 为入射光子的能量, E_g 为导带与价带之间的禁带宽度. 在光电流谱中实际测得的样品的光电流 I 与样品的吸收系数 α 成正比, 则通过曲线拟合可以得到禁带宽度的值. 在零偏压及 300 K 下, 拟合得到样品 A 与 B 和 C 的禁带宽度约为 1.043 eV 和 1.050 eV. 锗硅量子阱的能带结构如图 3. 因此图 1 所表示的吸收边对应于硅的价带到量子点中锗的导带的跃迁, 图 2 所表示的吸收边对应于硅的价带到量子阱中 $\text{Ge}_{0.2}\text{Si}_{0.8}$ 的导带的跃迁.

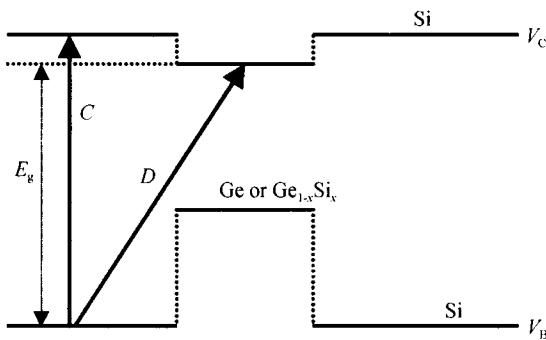


图 3 锗硅量子阱的能带示意图
Fig. 3 The sketch map of energy band of Si/Ge quantum wells

从图 1 和图 2 中可以看出, 随着外加电场的增强, 带边的吸收曲线向低能方向移动. 由于带间的禁带宽度不会随外加电场而改变, 因此, 这种现象只能说明: 在外加电场的作用下能量 $h\omega$ 比禁带宽度 E_g 小的光子也能引起吸收边的跃迁, 导致带边的吸收曲线向低能方向移动. 一般认为, 理想半导体材料的导带和价带之间存在一禁带, 在这个禁带内不允许存在电子态, 然而根据量子力学理论, 电子仍然有一定的几率隧穿进入禁带, 只是这种隧穿的几率非常小而已, 但是随着外加电场的增加, 这种隧穿几率也会增大.

图 4 说明了电场作用下隧穿几率的增加对带间

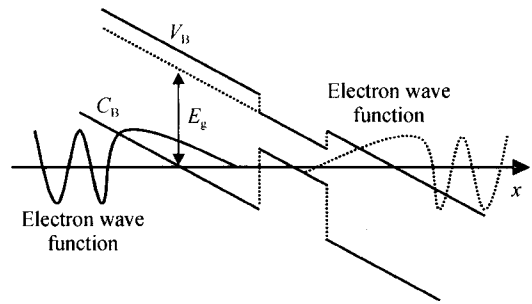


图 4 在电场作用下穿越禁带的电子隧穿过程
Fig. 4 The sketch map of electron tunneling band gap under electric field

吸收边的影响. 存在电场 ϵ 时, 导带和价带变得倾斜了, 但它们之间的禁带宽度 E_g 仍未改变, 这时电子所越过的三角势垒宽度不再是无穷大, 而变成了

$$d = E_g / e\epsilon \quad (2)$$

由式(2)可以看出, 随着电场 ϵ 的增加, 势垒宽度 d 减少了, 禁带中价带的波函数和导带的波函数的穿透增加, 它们在禁带中重叠的几率也增加, 因此电子穿越禁带的几率也增加. 在存在电场的情况下发生光吸收时, 由于有光子的参与, 这时三角势垒宽度进一步变小为

$$d' = (E_g - h\omega) / e\epsilon \quad (3)$$

从式(3)可以看出, 在存在电场的情况下, 隧道参与光吸收的过程变得更为明显. 这也说明当光子的能量小于禁带宽度时, 吸收系数并不马上下降为零, 而是存在一个吸收带尾, 如图 1 和图 2. 下面用量子力学隧道跃迁理论来计算这种几率与吸收系数的关系.

电子在电场 ϵ (假设其方向沿 x 方向) 下, 它的波函数满足薛定谔方程 (x 方向分量) 为

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) - e\epsilon x = E_x \Psi(x) \quad (4)$$

式中 m^* 为电子的有效质量, E_x 为 x 方向的动能, 其总动能还包括 y, z 方向的动能

$$E_y + E_z = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \quad (5)$$

令

$$\xi = -(x + \frac{E}{e\epsilon}) / (\frac{\hbar^2}{2m^* e\epsilon})^{1/3} \quad (6)$$

则式(4)变为

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \Psi(\xi) = \xi \Psi(\xi) \quad (7)$$

式(7)的解为艾里 (Airy) 函数. 为了满足电子波函数有限的条件, 当 ξ 为很大的正值时, 艾里函数渐近为

$$\Psi = \xi^{-1/4} \exp(-\frac{2}{3} \xi^{3/2}) \quad (8)$$

在光子参与隧道跃迁的情况下, 只要用 $h\omega - E_g$ 代替式(4)中的 E , 就可以近似得到类似式(8)的电子穿越禁带的衰减波函数. 光电流 $I(h\omega)$ 满足关系

$$I(h\omega) \propto \alpha(h\omega) \propto \int |\Psi(\xi)|^2 d\xi \quad (9)$$

如果只考虑衰减波函数中的指数项,可近似得到

$$I(h\omega) \propto \exp\left(-\frac{4\sqrt{2}m^*(E_g-h\omega)^{3/2}}{2e\epsilon\eta}\right) \quad (10)$$

式(10)表明当入射光子的能量($h\omega < E_g$)固定时,光电流 $I(h\omega)$ 随着外加电场的增强而增强;当固定光电流大小时,随着外加电场的增加,吸收边向低能方向移动. 吸收边向低能方向的偏移量 ΔE 与外电场 ϵ 的关系为

$$\Delta E = \left[\frac{3e\hbar}{4\sqrt{2}m^*} \epsilon \right]^{2/3} \quad (11)$$

作为估算,电子的有效质量 m^* 取为 $0.26m_0$ ^[14], m_0 为自由电子的质量, e 为电子的基本电荷,表 1 为样品 A 和 B 在不同偏压下 ΔE 的计算值和实验值,由于加在 A 与 B 上的电场基本一样,故近似认为 A、B 在不同偏压下 ΔE 的计算值和实验值是相同的. 从表中可以看出 ΔE 的计算值和实验值基本还是吻合的.

表 1 样品 A 和 B 在不同偏压下的计算值和实验值

| 外加偏压 /V | 外加电场/ (V · cm ⁻¹) | ΔE (计算值) | ΔE (实验值) |
|---------|----------------------------------|------------------|------------------|
| 0.2 | 4×10^3 | 3 meV | 2 meV |
| 0.5 | 1×10^4 | 5 meV | 3 meV |
| 1.0 | 2×10^4 | 8 meV | 4 meV |

现在来简单地讨论温度对带间吸收边的影响. 图 5 为样品 C 在不同温度下的带间吸收边的变化情况,从图 5 可以看出,随着温度的降低,带间吸收边向高能方向偏移. 温度对带间吸收边的影响可以从两个方面来考虑. 首先,温度导致晶格常量的变化而引起能带结构的变化,或者是能带边的移动;其次,温度会引起晶格振动状态的改变,即声子激发状态的改变,从而导致电子—声子耦合及其对能带微扰程度的变化. 这两种效应都能引起能带边缘的相对移动,因而导致吸收边能量的漂移. 图 6 为通过图 5 的在不同温度下的带间吸收边拟合得到的禁

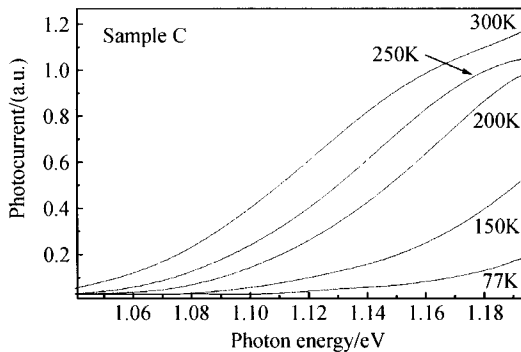


图 5 样品 C 在不同温度下的带间吸收曲线
Fig. 5 Band-to-band absorption curves of sample C at different temperature

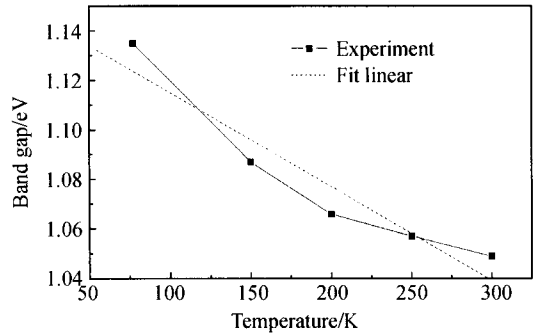


图 6 禁带宽度 E_g 与温度 T 的关系
Fig. 6 The relationship between band gap and temperature
带宽度 E_g 与温度 T 的关系. 从图中可以看到在温度较高时,禁带宽度 E_g 与温度 T 近似地成线性关系,经过线性拟合得到

$$\frac{dE_g}{dT} = 4 \times 10^{-4} \text{ eV/K} \quad (12)$$

3 结论

通过对锗硅量子阱材料的光电流谱的带间跃迁吸收边的拟合,得到了硅导带到锗价带的能带宽度分别为 1.043 eV 和 1.050 eV. 随着外加电场的增强,带边的吸收曲线向低能方向移动. 也通过理论计算得到了带间跃迁吸收边的漂移量与外加电场的关系,并与实验吻合较好. 随着温度的降低,带间吸收边向高能方向偏移,对于这一现象我们给出了定性的解释,并通过拟合得到了禁带宽度随温度的变化率.

参考文献

- 1 Nauka K, Kamins T I, Turner J E, et al. Admittance spectroscopy measurements of band offsets in Si/Si_{1-x}Ge_x/Si heterostructures. *Appl Phys Lett*, 1992, **60**(2): 195~197
- 2 Zhang S K, Zhu H J, Lu F, et al. Coulomb charging effect in self-assembled Ge quantum dots studied by admittance spectroscopy. *Phys Rev Lett*, 1998, **80**(15): 3340~3343
- 3 Biswas D, Debbar N, Bhattacharya P, et al. Conduction-band and valence-band offsets in GaAs/Ga_{0.51}In_{0.49}P single quantum-wells grown by metalorganic chemical vapor-deposition. *Appl Phys Lett*, 1990, **56**(9): 833~835
- 4 Anand S, Carisson N, Pistol M E, et al. Deep-level transient spectroscopy of inp quantum dots. *Appl Phys Lett*, 1995, **67**(20): 3016~3018
- 5 Lu F, Gong D W, Wang J B, et al. Capacitance-voltage characteristics of a Schottky junction containing SiGe/Si quantum wells. *Phys Rev B*, 1996, **53**(8): 4623~4629
- 6 Wang J B, Lu F, Zhang S K, et al. Analysis of capacitance-voltage characteristics of Si_{1-x}Ge_x/Si quantum-well structures. *Phys Rev B*, 1996, **54**(11):

- 7979~7986
- 7 Zhang S, K, Jiang Z M, Qin J, *et al.* Well depth fluctuation of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ quantum well structures studied by conductance-voltage technique. *J Appl Phys*, 1998, **84** (10): 5587~5592
- 8 Boucaud P, Le Thanh V, Sauvage S, *et al.* Intraband absorption in Ge/Si self-assembled quantum dots. *Appl Phys Lett*, 1999, **74**(3): 401~403
- 9 Eberl K, Lipinski M O, Manz Y M, *et al.* Self-assembling quantum dots for optoelectronic devices on Si and GaAs. *Physica E*, 2001, **9**(1): 164~174
- 10 李培成, 孙建诚, 胡辉勇. 光化学气相淀积 SiGe/Si 材料的机制分析. 光子学报, 2002, **31**(2): 293~296
- Li P X, Sun J C, Hu H Y. *Acta Photonica Sinica*, 2002, **31**(2): 293~296
- 11 吴兰. SiGe/Si 多量子阱中的光致子带间吸收研究. 光子学报, 2001, **30**(6): 704~708
- Wu L. *Acta Photonica Sinica*, 2001, **30**(6): 704~708
- 12 靳瑞英, 陈治明, 蒲红斌, 等. $\text{SiC}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{SiC}$ 异质结光电二极管特性的研究. 光子学报, 2005, **34**(2): 205~208
- Jin R Y, Chen Z M, Pu H B, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(2): 205~208
- 13 Ridley B K. Quantum process in semiconductors. Oxford: Clarendon Press, 1982. 209~213
- 14 Davies G. The optical properties of luminescence centres in silicon. *Phys Rep*, 1989, **176**: 83~188

Band-to-Band Absorption Edges Study of Si/Ge Quantum Wells

Huang Shihua

Physics Department, Zhejiang Normal University, Jinhua 321004

Received date: 2005-07-15

Abstract The band-to-band absorption edges of Si/Ge quantum wells were characterized by photocurrent measurement. The regular change of absorption edge was observed in different bias voltage and temperature condition. By fitting of band-to-band absorption edges, the bandgap of Si conduction band to Ge valence band was acquired. With the increase of external electric field, absorption edge curves shifted to low energy direction. By theory calculation, the relationship between the shift of absorption and external electric field was obtained, and it was well agreement with experiment. With the decrease of temperature, absorption edge shifted toward high energy direction. The qualitative analysis of this phenomena was given, and the change rate of bandgap with temperature was acquired by fitting.

Keywords Si/Ge quantum wells; Photocurrent absorption spectra; Band-to-band absorption edge; External electric field



Huang Shihua an associate professor was born in 1967. He is engaged in research on optoelectronic in semiconductor.