

## 量子干涉效应在红外探测器能带结构设计中的应用 \*

连洁<sup>1</sup>, 王青圃<sup>1</sup>, 程兴奎<sup>2</sup>, 张飒飒<sup>1</sup>, 姜军<sup>3</sup>, 张瑞峰<sup>1</sup>, 周均铭<sup>4</sup>, 黄绮<sup>4</sup>

(1. 山东大学 信息科学与工程学院, 山东 济南 250100; 2. 山东大学 物理与微电子学院, 山东 济南 250100; 3. 青岛大学 机电工程学院, 山东 青岛 266000; 4. 中国科学院 物理研究所, 北京 100080)

**摘要:** 利用量子干涉效应, 提出设计  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  量子阱红外探测器能带结构的方法。此法比 K-P 方法简便易行, 而且随着势垒宽度的增加, 两种方法所得结果趋于一致。这表明新方法更适合计算具有较宽势垒超晶格的电子态。另外, 用新方法对超晶格样品的光电流谱进行了分析, 所得结果比 K-P 方法更接近实验值。由此证实了量子干涉效应引起的电子能态的存在和新方法在量子阱红外探测器能带结构设计中的实用性。

**关键词:** 红外探测器; 超晶格材料; 量子干涉效应; K-P 方法; 能带结构

**中图分类号:** TN215    **文献标识码:** A    **文章编号:** 1007-2276(2005)03-0272-05

## Application of the quantum interference effect in designing energy band structure of the infrared photodetector\*

LIAN Jie<sup>1</sup>, WANG Qing-pu<sup>1</sup>, CHENG Xing-kui<sup>2</sup>, ZHANG Sa-sa<sup>1</sup>, JIANG Jun<sup>3</sup>, ZHANG Rui-feng<sup>1</sup>, ZHOU Jun-ming<sup>4</sup>, HUANG Qi<sup>4</sup>

(1. School of Information Science and Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China; 2. Institute of Physics and Microelectronics, Shandong University, Jinan 250100, China; 3. School of Machine Electronics, Qingdao University, Qingdao 266000, China; 4. Institute of Physics, the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract:** The electronic states of  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  superlattices are calculated by the quantum interference effect. Compared with the K-P method, it is found that the results of two methods are accordance with the increase of the barrier width. This indicates the new method is suitable for calculating the electronic states of superlattice with the wider barrier, and is easier to manipulate than the K-P method. In addition, the photocurrent spectrum of superlattice sample is analyzed by two methods. As a result, the data given by the new method is closer to the experimental results than that by the K-P method. This confirms that the electronic states caused by the quantum interference effect exist in superlattice, and the new method can be applied to design energy band structure of the infrared photodetector.

收稿日期: 2004-07-19; 修订日期: 2004-08-20

\*基金项目: 国家自然科学基金资助项目(69976016); 教育部博士点研究基金资助项目(20020422048); 山东省中青年科学家奖励基金项目(2004BS01007)

作者简介: 连洁(1964-), 女, 安徽阜阳人, 教授, 博士, 主要从事半导体材料光电特性、红外物理与技术方面的研究。

**Key words:** Infrared photodetector; Superlattice material; Quantum interference effect; K-P model; Energy band structure

## 0 引言

由于矩形势超晶格的生长工艺简单,广泛地应用在光调制器、半导体激光器和红外探测器等光电子器件中<sup>[1]</sup>,至今仍然吸引人们的关注。对于具有方势阱的超晶格来说,计算其能带结构的方法有许多种<sup>[2-4]</sup>,K-P方法<sup>[5]</sup>是理想的计算电子态的方法,但是其计算较为繁琐。

参考文献[6]讨论了电子波在超晶格中的干涉效应,但没有指出这种效应与材料电子态之间的关系。参考文献[7]虽然从实验上解释了这种关系,并由此提出计算电子态的方法,可是并没有把这种方法与其他方法比较,进而给出它的适用范围。基于电子波的反射和干涉,在有效质量近似下,提出设计GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As量子阱红外探测器能带结构方法,即计算GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As量子阱材料电子态的方法。光电流实验证实了该方法是正确的和易于操作的。

## 1 理论

图1给出GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As超晶格的势分布。假设超晶格的阱宽为a,垒厚为b,垒高为U<sub>0</sub>,电子在阱中

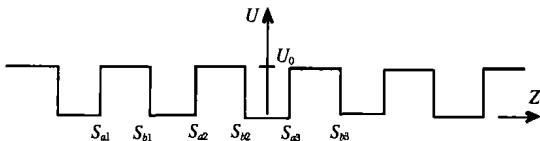


图1 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As超晶格的势分布

Fig.1 Potential distribution for GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As superlattice

的有效质量为m<sub>a</sub>,垒中为m<sub>b</sub>。在有效质量近似下 $\Psi(Z)=u(z)e^{\frac{ik_z \cdot Z}{2}}$ ,其中(z)=u(z+nd) $n=\pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ , $d=a+b$ 。 $k_z$ 是电子在Z方向的波矢。Z轴垂直于阱层。解薛定鄂方程求得在阱层和垒层传播的平面电子波 $\Psi_a(z)$ 和 $\Psi_b(z)$ 分别为:

$$\Psi_a(z)=Ae^{\frac{ik_z \cdot z}{2}}+A'e^{-\frac{ik_z \cdot z}{2}} \quad (1)$$

$$\Psi_b(z)=Be^{\frac{ik_z \cdot z}{2}}+B'e^{-\frac{ik_z \cdot z}{2}} \quad (2)$$

公式(1)和(2)中的第一项和第二项分别代表沿正、负Z方向传播的电子波。 $k_a$ 和 $k_b$ 分别是电子在阱层和垒层的波矢。它们满足以下方程:

$$k_a=\frac{1}{\hbar}(2m_a E)^{1/2} \quad (3)$$

$$k_b=\frac{1}{\hbar}[2m_b(E-U_0)]^{1/2} \quad (4)$$

设 $\lambda_a$ 和 $\lambda_b$ 分别是电子在阱和垒中的波长,那么它们可表示为:

$$\lambda_a=\frac{2\pi}{k_a}=\frac{\hbar}{(2m_a E)^{1/2}} \quad (5)$$

$$\lambda_b=\frac{2\pi}{k_b}=\frac{\hbar}{[2m_b(E-U_0)]^{1/2}} \quad (6)$$

根据量子力学理论,当电子波在超晶格中传播时,会受到阱和势垒界面的反射。如图1所示,这些界面标记为S<sub>a1</sub>,S<sub>b1</sub>,S<sub>a2</sub>,S<sub>b2</sub>…。当电子沿Z方向从左向右传播时,一部分入射波在界面S<sub>a1</sub>(S<sub>a2</sub>,S<sub>a3</sub>…)被反射,其余透射。透射的电子波行进到界面S<sub>b1</sub>(S<sub>b2</sub>,S<sub>b3</sub>…),被反射回界面S<sub>a1</sub>(S<sub>a2</sub>,S<sub>a3</sub>…)。这样在界面S<sub>a1</sub>(S<sub>a2</sub>,S<sub>a3</sub>…)两部分电子波发生干涉。两电子波的光程差为:

$$\Delta=2b+\frac{\lambda_b}{2} \quad (7)$$

式中 $\lambda_b/2$ 是半波损; $\Delta$ 是从同一势垒层不同界面反射的两电子波的光程差。同理,当电子沿z的负方向从右向左传播时,即从界面S<sub>b1</sub>(S<sub>b2</sub>,S<sub>b3</sub>…)向S<sub>a1</sub>(S<sub>a2</sub>,S<sub>a3</sub>…)行进时,在界面S<sub>b1</sub>(S<sub>b2</sub>,S<sub>b3</sub>…),两电子波也能发生干涉。此时两电子波的光程差也满足公式(7)。

根据干涉理论,如果

$$\Delta=2b+\frac{\lambda_b}{2}=(2n+1)\frac{\lambda_b}{2} \quad n=0,1,2,3\dots \quad (8)$$

两电子波之间发生相消干涉。这也表明电子波通过势垒的透过率为极大。

当然,如果电子波通过阱层传播,即从S<sub>b1</sub>(S<sub>b2</sub>,S<sub>b3</sub>…),行进到S<sub>a1</sub>(S<sub>a2</sub>,S<sub>a3</sub>…),或从S<sub>a1</sub>(S<sub>a2</sub>,S<sub>a3</sub>…),行进到S<sub>b1</sub>(S<sub>b2</sub>,S<sub>b3</sub>…),那么从一个阱层的两个不同界面反射的两束电子波也会发生干涉,其光程差可表示为:

$$\Delta = 2a - \frac{\lambda_a}{2} \quad (9)$$

式中  $\lambda_a/2$  是半波损。因此,当

$$\Delta = 2a - \frac{\lambda_a}{2} = 2n \frac{\lambda_a}{2} \quad n=0,1,2,3\cdots \quad (10)$$

时,将发生相长干涉,此时电子波通过阱层的透过率为极小。从方程(8)得出  $\lambda_b = \frac{2b}{n}$  和  $k_b = \frac{2\pi}{\lambda_b} = n \frac{\pi}{b}$ 。波长为  $\lambda_b$  的电子具有的能量为:

$$E'' = U_0 + \frac{\hbar^2 k_b^2}{2m_b} = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m_b} \left( \frac{\pi}{b} \right)^2 n^2 \quad n=1,2,3\cdots \quad (11)$$

由方程(11)可知,势垒以上存在分离的电子能态,其能量为  $E''$ 。具有能量  $E''$  的电子波不会很快指数衰减,而其行为类似平面波,它可沿  $z$  轴传播。由方程(10)得出  $\lambda_a = \frac{4a}{2n+1}$  和  $k_a = \frac{2\pi}{\lambda_a} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{a}$ , 所以波长

为  $\lambda_a$  的电子具有的能量满足下式:

$$E_{(n)} = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m_a} = \frac{\hbar^2}{2m_a} \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \quad n=0,1,2\cdots \quad (12)$$

能量为  $E_{(n)}$  的电子波透过阱层的几率很小,基本上定域在阱区。其中  $E_{(0)}$  是阱中最底能级。阱中电子遵循费米分布<sup>[8]</sup>,即电子占据费米能级和  $E_{(n)}$  之间各个能级。当电子受到光激发时,就可跃迁到  $E''$  形成光电流。量子阱中的费米能级满足下式:

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_a} \quad (13)$$

式中  $k_F = \sqrt{2\pi\sigma}$ , 其中  $\sigma = n_0a$  为电子的面密度,  $n_0$  为电子的体密度;  $E_F$  位于  $E_{(0)}$  以上。

综上所述,由于量子干涉效应,在阱区存在分离能态,它们是定域的。另外,在势垒以上也存在一些分离的电子态。这些分离态在阱区是弱定域的。当满足一定条件时,电子能够在弱定域态和强定域态之间跃迁。这些由量子干涉效应引起的分离态称为干涉态,与材料的结构参数有关。因此可根据器件的需要,选择合适的结构参数,设计满足要求的能带结构。这种计算能态的方法称为干涉法。

## 2 应用及讨论

为说明干涉法的应用和适用范围,分别用 K-P

方法和干涉法计算在不同势垒宽度下的基态和第一激发态,并画出这种关系曲线,如图 2 和图 3 所示。在计算中,取  $\Delta E_g = 1.247x$  eV ( $0 < x < 0.45$ );  $\Delta E_c = U_0 = 0.65 \Delta E_g$ ;  $m_a = 0.067m_0$ ;  $m_b = (0.067 + 0.083x)m_0$ <sup>[9]</sup>, 其中  $m_0$  为电子的自由质量; 势垒中铝组分  $x = 0.3$ ;  $a = 4.8$  nm。

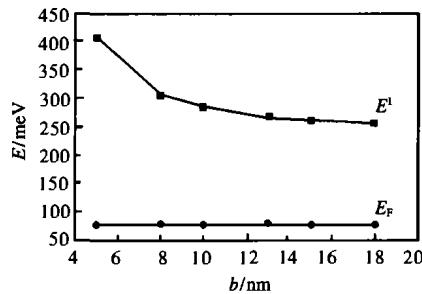


图 2 由干涉法计算的基态和第一激发态随势垒宽度变化的关系曲线

Fig.2 Ground and first excited states ( $E_F$  and  $E^1$ ) as a function of the barrier width using the interference method

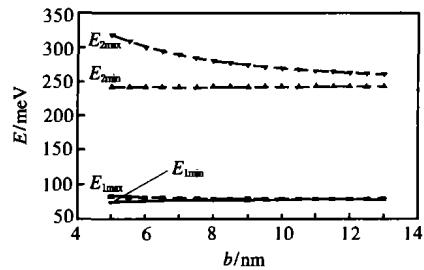


图 3 K-P 方法计算的基态和第一激发微带态随势垒宽度变化的关系曲线

Fig.3 Ground and first excited miniband states as a function of the barrier width using the K-P method

除此之外,图 4 还给出两种方法计算得到的从基态到第一激发态跃迁对应的量子阱红外探测器峰值波长与势垒宽度  $b$  的关系曲线。

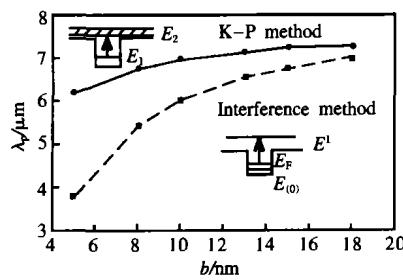


图 4 用干涉法(方块)和 K-P 方法(实心圆)计算的峰值波长随势垒宽度的变化曲线

Fig.4 Calculated peak wavelengths as a function of different barrier widths using the interference method (square) and the K-P method (solid circles)

如图2和图3所示,在势垒宽度较小时,由K-P方法得到的是能带,即阱中的基态微带和垒以上的第一激发微带。而由干涉法得到是分离的能级,即阱中的束缚态和垒以上的第一激发态。随着势垒宽度的增加,基态微带变成一分离能级,同样第一激发微带也变成一个能级。它们的数值和干涉法所得结果非常接近。这说明干涉法在较宽势垒中得到的结果与K-P方法一致,可以用它代替K-P方法设计器件的电子态。在势垒较窄时,势垒以上干涉能级的能量较高,电子跃迁到这些态的几率较小,从实验上就观察不到与它们有关的吸收峰。但是人们可根据需要采取一定措施,例如在势垒中插入一个或几个周期的超晶格形成 $\lambda/4$ 电子波堆<sup>[10]</sup>,提高电子从基态跃迁至这些干涉态的几率,设计出符合要求的器件。总之,在一般情况下,干涉法适合求势垒较宽的超晶格材料的电子态,而且此法简便易行。下面的实验既证实了势垒以上分离干涉态的存在,又说明了干涉法的应用。

利用MBE技术生长两个样品。1#样品:在半绝缘的GaAs衬底上生长1 μm厚掺Si( $n=2\times10^{18} \text{ cm}^{-3}$ )的GaAs接触层。然后,在此基础上生长50个周期GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As超晶格,其中GaAs阱宽4.8 nm,掺Si浓度为 $n=1\times10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ;Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As垒宽为10 nm。最后生长0.5 μm的GaAs接触层(掺Si, $n=2\times10^{18} \text{ cm}^{-3}$ )。2#样品:除垒宽变为50 nm、阱宽为5 nm和掺Si浓度变为 $n=7\times10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 以外,其他参数和1#的一样。在77 K时,分别测量两样品的光电流,结果如图5和图6所示。

从图5中可以看到几个峰值,一个最强峰位于 $\nu=$

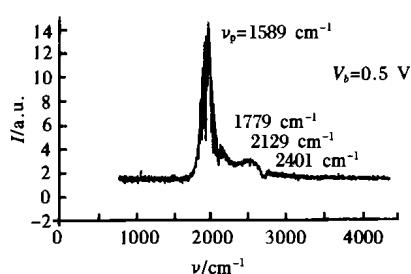


图5 在T=77 K,1#样品的光电流谱

Fig.5 Photocurrent spectrum at T=77 K for 1# sample

$1589 \text{ cm}^{-1}$ 处,对应波长 $\lambda_p=6.29 \mu\text{m}$ 。三个弱峰分别位于 $\nu=1779 \text{ cm}^{-1}$ , $\nu=2129 \text{ cm}^{-1}$ 和 $\nu=2401 \text{ cm}^{-1}$ 。从2#样品的光电流谱可知,一个强峰位于 $\nu=1208.5$

$\text{cm}^{-1}$ 处,对应波长 $\lambda_p=8.27 \mu\text{m}$ 。通过分析,上述这些强峰和弱峰是干涉态之间跃迁产生的,对弱峰的讨论发表在其他杂志上。用干涉法和K-P方法计算了强峰对应的波长,结果列在表1中。

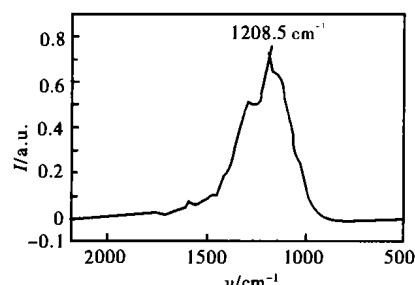


图6 在T=77 K,2#样品的光电流谱

Fig.6 Photocurrent spectrum at T=77 K for 2# sample

表1 两种方法计算的峰值波长和测量值的比较

Tab.1 Comparison of peak wavelengths calculated by two methods and measured by photocurrent spectrum

	1# sample	2# sample
$\lambda_p/\mu\text{m}$ (Interference method)	6.02	7.22
$\lambda_p/\mu\text{m}$ (K-P method)	6.97	7.39
$\lambda_p/\mu\text{m}$	6.29	8.27

从表1可以看出由两种方法所得结果与实验值相符。这证明了干涉态的存在以及干涉法的实用性。理论值与实验值的差异,一方面来自材料生长的精确控制程度和生长方向上各界面中产生的层厚无序涨落;另一方面是由于理论计算中近似条件的影响<sup>[11]</sup>。

### 3 结论

总结以上分析,得出以下结论:

(1) 基于电子波在超晶格界面的反射干涉效应,在超晶格的阱中或势垒以上,存在一些分离的能态样品的光电流谱证实了这一点。

(2) 在有效质量近似下,可计算量子干涉效应生成的分离能态,并能利用这种方法设计GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As量子阱红外探测器的能带结构。与K-P方法比较,此法适用于势垒较宽的量子阱材料,而且简单易行。另外,这种方法对其他光电器件能带结构的设计

也有参考价值。

### 参考文献:

- [1] Sim S K H,Liu H C,Shen A,et al.Effect of barrier width on the performance of quantum well infrared photodetector [J]. Infrared Physics & Technology,2001,42:115-121.
- [2] Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation [J].Phys Rev ,1981,B24:5693-5697.
- [3] Smith D L,Mailhot C.K-P theory of semiconductor superlattice electronic structure I formal results[J]. Phys Rev ,1986,B33:8345-8359.
- [4] Anemogiannis E,Glytsis E N,Gaylord K.Bound and Quasibound State Calculations for Biased/Unbiased Semiconductor quantum heterostructures[J].IEEE Journal of Quantum Electronics,1993,29:2731-2740.
- [5] C 基泰尔;杨顺华.固体物理导论[M].北京:科学出版社,1997.
- [6] Yuanjian Xu,Ali Shakouri,Ampcon Yariv.Quantum interference effect and electric field domain formation in quantum well infrared photodetectors [J].Appl Phys Lett,1995,66:3307-3309.
- [7] Cheng X K,Zhou J M,Huang Q.The reflection and interference of electrons at the interface of superlattice [J].Science In China,2002,45:115-121.
- [8] Kinch M A,Yariv A.Performance limitations of GaAs/AlGaAs infrared superlattices[J].Appl Phys Lett,1989,55(20):2093-2095.
- [9] Adachi S.GaAs,AlAs, and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As:material parameters for use in research and device application [J].J Appl Phys,1985,58:R1-R29.
- [10] Sirtori C,Capasso F,Faist J,et al.Quantum wells with localized states at energies above the barrier height:A fabry-Peror electron filter[J].Appl Phys Lett,1992,61(8):898-900.
- [11] 夏建白,朱帮芬.半导体超晶格物理[M].上海:上海科学技术出版社,1995.

(上接第 256 页)

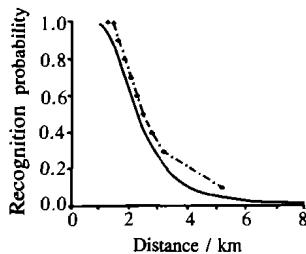


图 4 程序计算得到的识别概率与文献所提供的数据对比

Fig.4 Comparison between the calculated recognition probability and that in the document

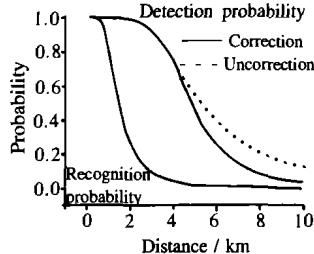


图 5 小目标修正方法的影响  
Fig.5 Effect of small target correction method

### 4 小结

本文考虑了影响红外成像导引头的多种因素,通过推导得到了计算红外成像导引头对扩展源目标的发现与识别概率的方法。根据此方法编制的程序,得到了合理的计算结果,并与已有的数据相一致。

针对目标为点源的情况,给出了用上述方法计算红外成像导引头的发现概率进行简单修正的方法。

通过程序计算,可以在已知目标高度,导引头高

度和两者之间距离的情况下简单、迅速并较为精确地得到导引头对目标的探测性能。可以用来对导弹和飞机的红外隐身效果进行评估,以及计算导弹发射后对目标实时的探测性能。

### 参考文献:

- [1] 杨宜禾.红外系统(第二版)[M].北京:国防工业出版社,1995.150-321.
- [2] 钟任华.飞航导弹红外导引头[M].北京:宇航出版社,1995.339-482.
- [3] 程东杰.热成像系统观察目标的发现概率与识别概率[J].激光与红外,1989,19(1):39~42.
- [4] 陈波若.红外系统[M].北京:兵器工业出版社,1995.199-237.
- [5] 张敬贤,李玉丹,金伟其.微光与红外成像技术[M].北京:北京理工大学出版社,1995.60-258.
- [6] Hadar O,Rotman S R,Kopeika N S.Thermal image target acquisition probabilities in the presence of vibrations[J].Infrared Phys Technol,1995, 36 (3):691-702.
- [7] 杨应槐,石峰.小目标探测技术的研究(上)[J].红外与激光技术,1989,18(1):17-19.