

InP/InGaAs 转移电子光阴极吸收层厚度设计与计算

任彬^{1,2,3}, 石峰^{1,2}, 郭晖^{1,2}, 焦岗成^{1,2}, 胡仓陆^{1,2}, 成伟^{1,2}, 徐晓兵^{1,2}, 王书菲^{1,2}

(1. 微光夜视技术重点实验室, 陕西 西安 710065;
2. 北方夜视科技集团股份有限公司, 云南 昆明 650223; 3. 北京理工大学 物理学院, 北京 100081)

摘要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法计算了 InP/InGaAs 转移电子光阴极吸收层材料的电学结构和光学性质, 交换关联能采用杂化泛函 HSE06 来描述。首先对闪锌矿结构 GaAs 材料能带图进行计算验证, 接着建立标准 InGaAs 材料体结构模型, 并对模型进行了动力学的自洽优化, 在优化后的基础上进行了非自洽的计算, 得到标准 InGaAs 材料的复介电函数, 然后根据 Kramers-Kronig 关系推出标准 InGaAs 材料光吸收系数。最后, 结合转移电子光阴极量子效率模型, 在给定 P 型标准 InGaAs 材料非平衡少数扩散长度分别是 0.8、1.0、1.2、1.4、1.6 和 2.0 mm 的条件下, 得到对能量在 0.780 260~0.820 273 eV 区间内、间距为 0.002 eV 的不同光子能量优化的 InP/InGaAs 转移电子光阴极吸收层厚度。

关键词: 标准 InGaAs; 转移电子光阴极; 密度泛函理论

中图分类号: TN216 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2276(2015)10-3010-05

Design and calculation of absorption layer thickness on InP/InGaAs transferred-electron photocathode

Ren Bin^{1,2,3}, Shi Feng^{1,2}, Guo Hui^{1,2}, Jiao Gangcheng^{1,2}, Hu Canglu^{1,2}, Cheng Wei^{1,2},
Xu Xiaobing^{1,2}, Wang Shufei^{1,2}

(1. Science and Technology on Low-Light-Level Night Vision Laboratory, Xi'an 710065, China;
2. North Night Vision Technology Group Co., Ltd, Kunming 650223, China;
3. Department of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: The electronic structure and optical properties of standard InGaAs material, which formed the absorption layer of transferred-electron InP/InGaAs photocathode, were studied based on the density functional theory, the exchange and correlation potential energy was described by Heyd-Scuseria-Ernzerh (HSE06). First, the energy band structure of zinc blende GaAs was verified with this hybrid density functional, then the standard InGaAs bulk model was established, and dynamically optimized by self-consistent method before complex dielectric function was obtained, then the optical absorption coefficient was derivated from Kramers-Kronig relation. Finally, under the estimation of P-type standard InGaAs unequilibrium minority carriers effusion length were 0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6 and 2.0 m separately, combined with quantum efficiency formula of transferred-electron photocathode, the optimized absorption

收稿日期: 2015-02-11; 修订日期: 2015-03-03

基金项目: 微光夜视技术重点实验室基金(J20130501)

作者简介: 任彬(1981-), 男, 高级工程师, 硕士, 主要从事外延材料生长方面的研究。Email: robinson_cv@163.com

layer thickness of InP/InGaAs photocathode was derived according to the photon energy between 0.780 260 eV and 0.820 273 eV with spacing 0.002 eV.

Key words: standard InGaAs; transferred-electron photocathode; density functional theory

0 引言

自然界里的夜天辐射来自太阳、月球、地球、星球、云层、大气等自然辐射源。通过对夜天辐射光谱分布的分析可以得出,有月时的光谱辐射分布与太阳光谱相近,而在无月星空时的辐射光谱中,短波红外辐射急剧增加,甚至远远超过可见光部分辐射,其峰值响应波长达 1.2~1.7 μm 。夜天辐射光谱的这种客观现状是促使人们孜孜不倦、不断开发在近红外至短波红外波段有高灵敏度响应的光阴极象增强器的原始动力,目标即使像增强器的响应波长尽可能覆盖夜天光的辐射波长范围。In_xGa_{1-x}As 材料作为光敏感材料,其响应波段可通过调节 In 组分 x 值获得 0.87~3.5 μm 的响应,其探测器的工作波段范围覆盖可见光和夜天光能量^[1-2]。

In_xGa_{1-x}As 材料在光电阴极领域的重要应用方向是制备转移电子(TE)光电阴极,TE 光电阴极是一种场助光电阴极,借助耿氏效应利用电场的作用将导带主极小值 Γ 能谷上的电子散射到较高的卫星谷上去,从而造成负电子亲和势的发射条件^[3-6]。它是在(100)取向或(111)B取向的、掺 Cr 的半绝缘 InP 衬底上,通过液相外延、气相外延或者分子束外延的方法生长。外延层掺 P 型杂质 Zn 或 Cr。已有报道的 InGaAs 光电阴极像增强器在 1.06 μm 处的辐射灵敏度为 2 mA/W,相当于量子效率约为 0.23%,In 的含量占 15%。而 Hamamatsu V8071U InGaAs 像增强器光谱响应范围从 360~1 100 nm,1 μm 处波长量子效率为 1%,辐射灵敏度为 8 mA/W^[7]。当 In 含量值 $x=0.53$ 时,InGaAs 与 InP 材料晶格匹配,此时器件响应波长截至为 1.7 μm ,因此采用 InP 材料作为衬底材料,可生长获得大面积、晶体质量好的 In_{0.53}Ga_{0.47}As 材料,In_{0.53}Ga_{0.47}As 材料称之为标准 InGaAs 材料^[1]。

1 理论模型和计算方法

1.1 模型

理论上,用第一性原理计算时,构造标准

InGaAs 材料的结构需要建立很大的超晶胞,导致利用杂化泛函的方法几乎无法实现。因此,建立如图 1 的 In_{0.5}Ga_{0.5}As 晶胞模型^[6]。In_{0.5}Ga_{0.5}As 具有闪锌矿结构,其空间群为 F43m(216),晶格常数为 $a=b=c=0.565 \text{ nm}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$,每个晶胞中含有 2 个 Ga 原子、2 个 In 原子和 4 个 As 原子,在体对角线的 1/4 处为 In 和 Ga 原子,8 个角和 6 个面心为 As 原子。

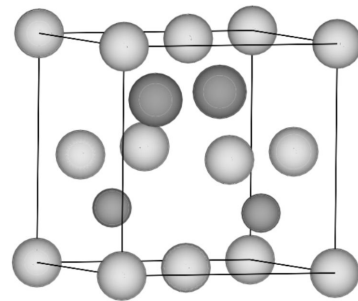


图 1 InGaAs 晶胞模型

Fig.1 InGaAs unit cell

1.2 计算方法

在采用第一性原理计算半导体合金时,通常采用局域密度近似(LDA)和广义梯度近似(GGA)势来描述电子间的交换关联作用,这两种局域/半局域势在描述固体原子的电离能、解吸能、结合能以及键长方面取得了相当精确的结果,但对于半导体重要的参数—禁带宽度会严重低估,进而也严重影响到半导体材料的光学性质。一个改进的方法是采用屏蔽的 Heyd-Scuseria-Ernzerhof(HSE06)杂化泛函,它混合了非局域的 Hartree-Fock(HF)精确交换和局域/半局域的密度泛函交换,在计算半导体、绝缘体及金属的晶格常数、体模量、禁带宽度、表面吸附能等方面得到广泛的应用^[8-9]。

文中的计算工作采用基于平面波赝势(PWP)的 DFT 理论的第一性原理方法,平面波截断动能 $E_{\text{cut}}=350 \text{ eV}$,交换-关联能即采用(HSE06)杂化泛函来描述。计算中晶格常数初始优化取实验值,能量的计算在倒易空间中进行。在进行弛豫计算时,在保证原胞的体积下,改变原胞的形状和原子位置,布里渊区积分时采用 Monkhorst-Pack 的 $7 \times 7 \times 7$ 进行分格,收敛

精度为 1×10^{-5} eV/atom, 原子之间的相互作用力收敛精度为 2×10^{-3} eV/nm。参与计算的元素电子态为 $\text{Ga}3d^{10}4s^24p^1, \text{As}3d^{10}4s^24p^3, \text{In}4d^{10}5s^25p^1$ 。

2 计算结果与讨论

2.1 GaAs 能带结构

为了与一般 DFT 计算的研究进行比较, 首先计算闪锌矿 GaAs 沿布里渊区高对称点方向的能带图, 如图 2 所示, 价带顶和导带底都位于 Gamma(G)点, 带隙宽度为 1.3 eV, 略低于实验 1.5 eV 的结果, 但明显好于采用 GGA-PBE(0.329 eV)、LDA(0.099 eV) 交换关联势的计算结果^[10]。

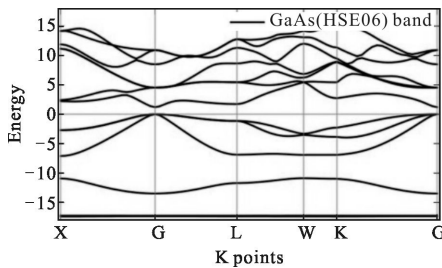


图 2 GaAs 能带图, 交换关联能采用 HSE06

Fig.2 GaAs energy band structure with HSE06 hybrid functional

2.2 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 态密度

态密度是研究材料电子结构和行为的重要工具, 图 3(a)、(b)、(c)分别画出了采用 HSE06 势计算得到的总态密度和 Ga、As、In 原子局域态密度。能量最低的下价带主要表现为 Ga 的 3d 和 In 的 4d 电子局域态特征, 其能量范围在 -18~-16 eV 之间, 且 In 的 4d 电子能级要高于 Ga 的 3d 电子能级; 能量稍高的中价带主要表现为 As 的 4s 电子态, 也包含少量的 Ga 的 4s 和 In 的 5s 电子态, 其能量范围在 -13~-11 eV 之间; 上价带由两部分构成, 其中低能量区域主要由 Ga 和 In 的 s 电子态和 As 的 p 电子态构成, 高能量区域则由 3 个原子的 p 电子态构成; 能量最高的导带则由 Gasp 和 Insp 杂化的反键态和 As 的 4p 空电子态构成。

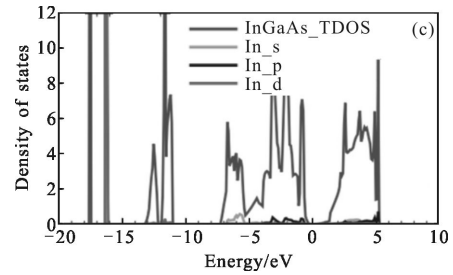
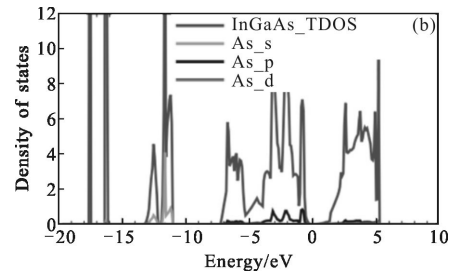
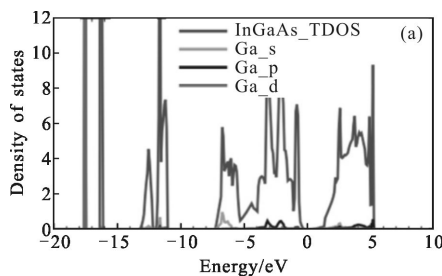


图 3 InGaAs 材料的总态密度及局域态密度

Fig.3 Total density of states and local density of states in InGaAs

2.3 InGaAs 光学性质

晶体材料的介电函数是描述外电场作用下体系线性响应的一个二阶张量, 可由复介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 来描述。在线性响应范围内, 固体宏观光频响应信息可以由复介电函数得到, 其中虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 被认为是沟通带间跃迁微观物理过程和固体电子结构的桥梁, 可由占据轨道波函数和非占据轨道波函数之间的动量跃迁矩阵元来计算, 如公式(1)所示。

$$\epsilon_2 = \frac{\pi}{\epsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right)^2 \cdot \sum_{v,c} \int_{BZ} \frac{2dK}{(2\pi)^3} |a \cdot M_{cv}|^2 \times \delta[E_c(K) - E_v(K) - \hbar\omega] \quad (1)$$

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{2e}{\epsilon_0 m^2} \cdot \sum_{v,c} \int_{BZ} \frac{2dK}{(2\pi)^3} \times \frac{|a \cdot M_{cv}|^2}{E_c(K) - E_v(K)} \times \frac{\hbar^3}{[E_c(K) - E_v(K)]^2 - \hbar^2 \omega^2} \quad (2)$$

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{0.5} + \epsilon_1]^{0.5} \quad (3)$$

$$k(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{0.5} - \epsilon_1]^{0.5} \quad (4)$$

$$R(\omega) = \frac{[n(\omega) - 1]^2 + k^2(\omega)}{[n(\omega) + 1]^2 + k^2(\omega)} \quad (5)$$

$$\alpha(\omega) = \frac{2\omega k(\omega)}{c} \quad (6)$$

式中: C, V 分别代表导带和价带, BZ 为第一布里渊区; K 为倒格氏; $a \cdot M_{cv}$ 为动量跃迁矩阵元; a 为单位方向矢量; E_c, E_v 分别对应导带和价带的本征能级; $n(\omega)$ 和 $k(\omega)$ 分别对应折射率和消光系数; $R(\omega)$ 为反

射系数; $\alpha(\omega)$ 为吸收系数。

图 4 是计算得到的标准 InGaAs 的复介电函数实部和虚部随能量变化的曲线图。InGaAs 零频介电常数 $\epsilon_1(0)=14.4$, 这与参考文献[11]给出的 $\epsilon_1(0)=13.9$, 较为一致。图 5 是计算得到的标准 InGaAs 的光吸收系数。

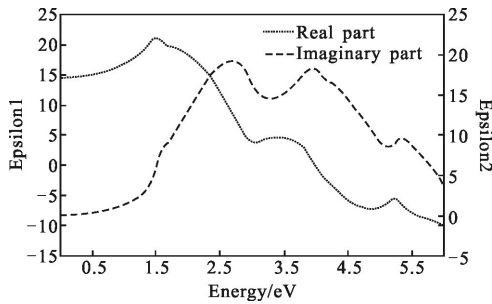


图 4 标准 InGaAs 材料的复介电常数

Fig.4 Complex dielectric function of standard InGaAs material

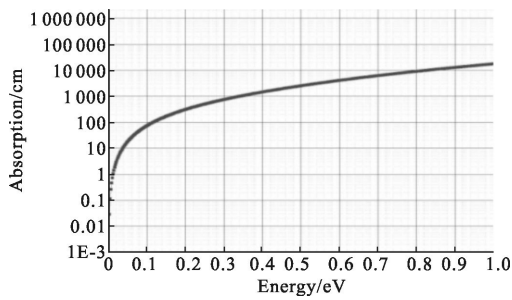


图 5 InGaAs 的光吸收系数

Fig.5 Optical absorption coefficient of InGaAs

2.4 InGaAs 吸收层厚度优化

根据 Spicer 三步模型理论,采用唯象近似,在忽略光电阴极有效层与光电阴极窗口层界面的载流子复合效应,也忽略了光电子发射表面光反射以及阴极有效层内光的多次反射对吸收的影响,同时假定能够最终产生光电子发射的有效吸收系数和入射光在光电阴极中的总吸收系数之比为 1,透射式光阴极的量子效率为^[12-13]:

$$Y = \frac{P_E}{1 + \frac{1}{\alpha L}} \cdot \left[\exp\left(-\frac{T}{L}\right) - \exp(-\alpha T) \right] \quad (7)$$

式中: α 吸收系数; L 为少数扩散长度; P_E 为到达表面的光电子的逸出几率; T 为转移电子光阴极的吸收层厚度。可以看出,透射式光电阴极的量子效率是阴极厚度 T 的函数。进一步,从公式(7)中看出:厚度 T 为极大和极小两个极端情况下, Y 值很小,中间存

在最佳厚度 T 使量子效率 Y 极大。由于吸收系数 α 与光子能量相关,故最佳厚度 T 也是光子能量的函数。当 $\frac{dY}{dT}=0$ 时,得到量子效率为极大值时的厚度为:

$$T = \frac{\ln(\alpha L)}{1 - \frac{1}{\alpha L}} \quad (8)$$

当厚度很薄时,尽管激发的光电子都能逸出,但由于大部分光穿过光阴极,没有被有效吸收,因此量子效率必然较低。反之,当阴极有效层很厚,以至于比光电子逸出深度很大时,虽然光的吸收充分,但不是所有激发的光电子都能到达发射表面,因此量子效率也会很低。只有当阴极厚度与光吸收长度和载流子扩散长度恰当匹配时才能获得高的量子效率。计算出的 P 型标准 InGaAs 材料非平衡少数扩散长度分别是 0.8、1.0、1.2、1.4、1.6 和 2.0 μm 的条件下,不同光子能量优化的 InP/InGaAs 转移电子光阴极吸收层优化厚度如图 6 所示。

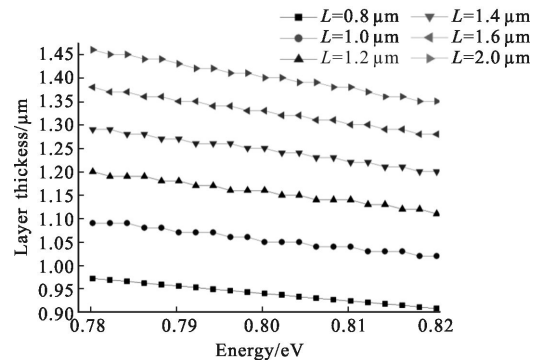


图 6 不同扩散长度下的吸收层厚度

Fig.6 Absorption layer thickness of different diffusion length

3 结论

采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法计算了 InP/InGaAs 转移电子光阴极吸收层材料的态密度、复介电函数及光吸收系数,最后结合传统光电阴极的设计模型得到直接转移型 InP/InGaAs 转移电子光阴极吸收层的优化设计厚度。由以上计算可知,交换关联能采用杂化泛函 HSE06 相比传统的局域/半局域 LDA 或 GGA 带来复介电函数和能带结构准确度极大的提升。文中的结论为实验设计针对不同入射光子能量优化的直接转移型 InP/InGaAs 转移电子光阴极吸收层厚度提供了重要的理论依据。

参考文献:

- [1] Shi Yanli, Lv Yuzeng, Zhao Lusheng, et al. In_xGa_{1-x}As low-light night vision devices[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(12): 3367–3372. (in Chinese)
史衍丽, 吕玉增, 赵鲁生, 等. In_xGa_{1-x}As 高性能全固态数字化微光器件[J]. 红外与激光工程, 2013, 42(12): 3367–3372.
- [2] Shi Yanli, Hu Rui, Zhang Weifeng, et al. Progress of InGaAs Solid-state Low-Light Device[J]. *Infrared Technology*, 2014, 36(2): 81–88. (in Chinese)
史衍丽, 胡锐, 张卫锋, 等. InGaAs 固体微光器件研究进展[J]. 红外技术, 2014, 36(2): 81–88.
- [3] Sinor Timothy W, Estrera Joseph P, Couch David G, et al. Night vision device, image intensifier and photomultiplier tube, transfer-electron photocathode for such, and method of making: united states patent, 6, 121, 612[P]. 2000–09–19.
- [4] Sun Qiaoxia, Xu Xiangya, An Yingbo, et al. Numerical study on time response characteristics of InP/InGaAs/InP infrared photocathode [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2013, 42(12): 3163–3167. (in Chinese)
孙巧霞, 徐向晏, 安迎波, 等. InP/InGaAs/InP 红外光电阴极时间响应特性的模拟研究 [J]. 红外与激光工程, 2013, 42(12): 3163–3167.
- [5] Jia Zhenggen. Study of the InGaAs photocathode image intensifiers[J]. *Infrared and Laser Engineering*, 1999, 28(6): 64–67. (in Chinese)
贾正根. InGaAs 光电阴极像增强器研究[J]. 红外与激光工程, 1999, 28(6): 64–67.
- [6] Parker T R, Fawcett A H, Phillips C C, et al. Gatable ultrafast field-assisted photoemission to form In_{0.5}Ga_{0.5}As heterostructures[J]. *Appl Phys Lett*, 1994, 65(21): 2711–2713.
- [7] Wang Wangping, Ma Jianyi. Material and fabrication process of near infrared response III – V compound semiconductor photocathode [J]. *Optoelectronic Technology*, 2013, 33(3): 194–197. (in Chinese)
王旺平, 马建一. 近红外响应的 III – V 族半导体光电阴极材料及工艺[J]. 光电子技术, 2013, 33(3): 194–197.
- [8] Krukau Aliaksandr V, Vydrov Oleg A, Lzmaylov Artur F, et al. Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals[J]. *J Chem Phys*, 2006, 125: 224106.
- [9] Joachim Paier, Martijn Marsman, Georg Kresse. Why does the B3LYP hybrid functional fail for metals [J]. *J Chem Phys*, 2007, 127: 024103.
- [10] Najwa Anua N, Ahmed R, Saeed M A, et al. DFT investigations of structural and electronic properties of gallium arsenide (GaAs) [C]//AIP Conference Proceedings, 2012, 1482: 64.
- [11] Goldberg Yu A, Shmidt Natalya M. Handbook series on semiconductor parameter [M]. Singapore: World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 1999: 55.
- [12] Zhao Jing. Research on optical and photoemission performances of transmission-mode GaAs photocathode [D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2013. (in Chinese)
赵静. 透射式 GaAs 光电阴极的光学与光电发射性能研究 [D]. 南京: 南京理工大学, 2013.
- [13] Jia Xinzhi. Semiconductor Photocathodes [M]. Beijing: Science Press, 2013: 122. (in Chinese)
贾欣志. 半导体光电阴极[M]. 北京: 科学出版社, 2013: 122.