

InAs/GaSb 超晶格和 M 结构超晶格能带结构研究

李俊斌¹, 刘爱民², 蒋志¹, 孔金丞¹, 李东升¹, 李艳辉¹, 周旭昌¹, 杨雯¹

(1. 昆明物理研究所, 云南 昆明 650223; 2. 大连理工大学 物理学院, 辽宁 大连 116024)

摘要: 本文通过 k-p 方法研究了传统 InAs/GaSb 超晶格和 M 结构超晶格的能带结构。首先, 计算了不同周期厚度的 InAs/GaSb 超晶格的能带结构, 得到用于长波超晶格探测器吸收层的周期结构。然后, 计算了用于超晶格长波探测器结构的 M 结构超晶格的能带结构, 并给出长波 InAs/GaSb 超晶格与 M 结构超晶格之间的带阶。最后, 基于能带结构, 计算出长波超晶格与 M 结构超晶格的态密度, 进而得出的载流子浓度(掺杂浓度)与费米能级的关系。这些材料参数可以为超晶格探测器结构设计提供基础。

关键词: k-p 方法; InAs/GaSb 超晶格; M 结构超晶格; 能带结构; 掺杂浓度

中图分类号: TN213 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-8891(2021)07-0622-07

Investigation of Energy Band Structures of InAs/GaSb and M Structure Superlattices

LI Junbin¹, LIU Aiming², JIANG Zhi¹, KONG Jincheng¹, LI Dongsheng¹,
LI Yanhui¹, ZHOU Xuchang¹, YANG Wen¹

(1. Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China;

2. School of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: In this study, the band structures of conventional InAs/GaSb and M structure super lattices are investigated using the k-p method. First, the band structures of InAs/GaSb super lattices with various period thickness are calculated, and the period structure used for a longwave super lattice detector is obtained. Subsequently, the band structure of the M structure super lattice, which is prevalently employed in longwave super lattice infrared detectors, is also calculated. The band offset between a longwave InAs/GaSb super lattice and M structure super lattice is provided. Furthermore, based on the band structures, the relationship between the carrier density (doping density) and the position of the Fermi level for longwave InAs/GaSb and M structure super lattices is obtained. This was followed by a density of states (DOS) calculation. These calculated material parameters can provide the foundation for designing super lattice infrared detectors.

Key words: k-p method, InAs/GaSb superlattice, M structure super lattice, energy band structure, doping density

0 引言

InAs/GaSb 二类超晶格是近年来飞速发展的 III-V 族红外探测器技术, 是当前唯一在理论极限性能上超过碲镉汞的红外探测材料^[1]。InAs/GaSb 二类超晶格的概念由 Esaki 等人在 1977 年提出^[2], 此后, Smith 和 Maihiot 在 1987 年提出了将 InAs/GaSb 二类超晶格用于红外探测的设想^[3]。由于其能带可灵活操控, 有

效质量大, 俄歇复合抑制^[4], 以及材料高均匀性等优点, 使得 InAs/GaSb 二类超晶格成为第三代红外探测器重点关注的材料。另外, InAs、GaSb、AlSb 都属于 6.1Å 材料家族, 相似的晶格常数, 为生长高质量的超晶格材料奠定了基础。InAs/GaSb 二类超晶格特殊的能带排列, 使得电子和空穴分别被限制在 InAs 层和 GaSb 层中, 不同 InAs 层中的电子波函数相互交叠, 形成电子微带, 不同 GaSb 层中的空穴波函数相

收稿日期: 2021-04-20; 修订日期: 2021-05-25.

作者简介: 李俊斌 (1989-), 男, 云南昌宁人, 博士, 工程师, 主要从事红外光电材料与器件方面的研究工作。E-mail: junbin_lee666@163.com.

通信作者: 孔金丞 (1979-), 男, 云南南华人, 博士, 研究员, 主要从事红外材料与器件研究。E-mail: kongjincheng@163.com.

互交叠,形成空穴微带。超晶格的有效带隙为电子微带到重空穴微带之间的能量差,光学跃迁发生在电子微带和重空穴微带之间,以此探测红外辐射。根据量子限制效应,通过改变超晶格的周期厚度,超晶格材料的有效带隙对应的截止波长可以在 3~30 μm 之间连续可调。

由于 InAs/GaSb 二类超晶格材料的少数载流子寿命较短,主要是 Shockley-Read-Hall (SRH) 过程决定,仅为 30~100 ns^[5]。因此,超晶格红外探测器的暗电流(主要是产生复合电流)一直高于碲镉汞探测器。为了抑制暗电流,提高器件性能,超晶格红外探测器的研究人员设计出了不同类型的势垒型探测器结构,如美国西北大学提出的 p-π-M-N 结构^[6],美国喷气推进实验(Jet propulsion laboratory, JPL)提出的 complementary barrier infrared detector(CBIRD)结构^[7],以色列 Semi-Conductor Device 公司(简称 SCD 公司)提出的 pBp 结构^[8],美国海军实验室提出的 graded-gap type-II “W” superlattice photodiode (GGW) 结构^[9]。势垒型探测器是短 SRH 寿命材料更好的选择,势垒层的引入很大程度上抑制了暗电流。实际研究中,在确定具体器件结构的情况下,为了得到高性能的超晶格红外探测器,必须对势垒型探测器结构进行设计。而器件设计的基础是组成器件结构的各层超晶格材料的材料参数。对于器件结构设计比较重要的材料参数有吸收层与势垒层的带隙,吸收层与势垒层组成的异质结之间的能带带阶,掺杂浓度与费米能级的关系等。超晶格与碲镉汞材料不同,其带隙、异质结能带带阶不能通过与组分相关的简单的函数关系得到,必须通过能带计算获得。超晶格材料的掺杂浓度与费米能级之间的关系,也不如传统半导体体材料的计算公式直观,需要在能带结构基础上,计算出态密度,进而计算得到。

本文以美国西北大学 P-π-M-N 超晶格长波探测器结构为基础,通过 k·p 能带计算方法对其中的 π 吸收层和 M 势垒层的超晶格材料参数进行计算,为器

件结构设计提供基础。首先,通过 k·p 方法计算吸收层 InAs/GaSb 超晶格带隙随周期厚度的变化,给出了用于长波超晶格探测器吸收层的周期结构。然后,计算出长波 P-π-M-N 探测器结构中常用的 M 结构超晶格的能带,获得 M 超晶格势垒层与吸收层之间的带阶。最后,在能带结构基础上,计算吸收层和势垒层的态密度,进而计算载流子浓度(掺杂浓度)与费米能级的关系。

1 理论基础

1.1 8 带 k·p 模型

本文中的二类超晶格能带计算模型是用于闪锌矿直接带隙半导体材料的 8 带 k·p Kane 模型^[10],包括了最低的两个导带,最高的 6 个价带(两个重空穴带、两个轻空穴带、两个自旋劈裂带),并通过 Pikus-Bir 理论考虑了应变效应^[11]。

基于下列基函数:

$$\begin{aligned}
 u_1 &= |s_{1/2,1/2}\rangle = |S \uparrow\rangle, \\
 u_2 &= |s_{1/2,-1/2}\rangle = |S \downarrow\rangle, \\
 u_3 &= |p_{3/2,3/2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X+iY) \uparrow\rangle, \\
 u_4 &= |p_{3/2,1/2}\rangle = -\frac{i}{\sqrt{6}}|(X+iY) \downarrow - 2Z \uparrow\rangle, \\
 u_5 &= |p_{3/2,-1/2}\rangle = -\frac{i}{\sqrt{6}}|(X+iY) \uparrow + 2Z \downarrow\rangle, \\
 u_6 &= |p_{3/2,3/2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X-iY) \downarrow\rangle, \\
 u_7 &= |p_{1/2,1/2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}|(X+iY) \downarrow + Z \uparrow\rangle, \\
 u_8 &= |p_{1/2,-1/2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}}|-(X-iY) \uparrow + Z \downarrow\rangle,
 \end{aligned} \quad (1)$$

8×8 的 Kane 哈密顿矩阵可以表示为:

$$\mathbf{H}_{8 \times 8}^{\text{Kane}} = \begin{bmatrix} R & 0 & i\sqrt{3}S & \sqrt{2}T & iS^* & 0 & iT & \sqrt{2}S^* \\ 0 & R & 0 & iS & \sqrt{2}T & i\sqrt{3}S^* & \sqrt{2}S & iT \\ -i\sqrt{3}S^* & 0 & p+Q & iB & -G & 0 & -B/\sqrt{2} & i\sqrt{2}G \\ \sqrt{2}T & -iS^* & -iB^* & P-Q & 0 & -G & -i\sqrt{2}Q & -\sqrt{3}/2B \\ -iS & \sqrt{2}T & -G^* & 0 & P-Q & -iB & -i\sqrt{3}/2B^* & i\sqrt{2}Q \\ 0 & -i\sqrt{3}S & 0 & -G^* & iB^* & P+Q & i\sqrt{2}G^* & -B^*/\sqrt{2} \\ -iT & \sqrt{2}S^* & -B^*/\sqrt{2} & i\sqrt{2}Q & -i\sqrt{3}/2B & -i\sqrt{2}G & P-\Delta & 0 \\ \sqrt{2}S & -iT & -i\sqrt{2}G^* & -i\sqrt{3}/2B^* & i\sqrt{2}Q & -B/\sqrt{2} & 0 & P-\Delta \end{bmatrix} \quad (2)$$

式中:

$$\begin{aligned}
 R &= E_c + \left(\frac{1}{2m_c'}\right)(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \\
 P &= E_v - \left(\frac{1}{2m_0}\right)\gamma_1(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \\
 Q &= -\left(\frac{1}{2m_0}\right)\gamma_2(p_x^2 + p_y^2 - 2p_z^2), \\
 G &= \left(\frac{1}{2m_0}\right)\sqrt{3}[\gamma_2(p_x^2 - p_y^2) - 2i\gamma_3 p_x p_y], \\
 B &= \left(\frac{1}{2m_0}\right)2\sqrt{3}\gamma_3(p_x - ip_y)p_z, \\
 T &= \left(\frac{1}{\sqrt{3}\hbar}\right)P_0 p_z, \\
 S &= \left(\frac{1}{\sqrt{3}\hbar}\right)P_0(p_x + ip_y).
 \end{aligned}$$

式中: $p=(p_x, p_y, p_z)$, $p_x=-i\hbar\partial/\partial x$ 是沿着 x 方向的动量运算符; E_c 和 E_v 分别是导带和价带的带边; Δ 是自旋劈裂能; m_0 是自由电子质量; m_c' 是导带修正的电子有效质量; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 是价带修正的 Luttinger 参数, 带间矩阵元 $P_0=-i(\hbar/m_0)\langle S|p_x|X\rangle$ 。能带结构计算中用到的修正的电子有效质量和 Luttinger 参数通过 $1/m_c'=1/m_c'-2E_p/3E_g-E_p/3(E_g+\Delta)$, $\gamma_1=\gamma_1^L-E_p/3E_g$, $\gamma_2=\gamma_2^L-E_p/6E_g$, $\gamma_3=\gamma_3^L-E_p/6E_g$ 关系给出, m_c' 是电子有效质量, E_g 是带隙, E_p 由定义 $E_p=2m_0(P_0)^2/\hbar$ 给出, $\gamma_1^L, \gamma_2^L, \gamma_3^L$ 是 Luttinger 参数。本文用到的计算参数都来源于文献[12]。

将波函数 $\Psi_{k_\square}(R)$ 展开成布里渊区中心 Bloch 态 $u_n(r)$ 和 z 方向波函数 $F_n(k_\square, z)$ 的线性组合:

$$\Psi_{k_\square}(R) = \sum_{n=1}^8 e^{ik_\square \cdot r} u_n(r) F_n(k_\square, z) \quad (3)$$

式中: $R=(r, z)=(x, y, z)$, $k_\square=(k_x, k_y)$, 是电子和空穴的平面波矢; n 是能带指数; $F_n(k_\square, z)$ 是电子或空穴沿着 z 方向的波函数。在包络函数近似下, 如果 $\Psi_{k_\square}(R)$ 是多带薛定谔方程:

$$[H_0(p) + U(z) - E(k_\square)]\Psi_{k_\square}(R) = 0 \quad (4)$$

的解, 那么 $F_n(k_\square, z)$ 可以通过解下列方程:

$$[H_0(k_\square, p_z) + U(z) - E(k_\square)]F_n(k_\square, z) = 0 \quad (5)$$

得到, 其中 $U(z)$ 是沿着生长方向由不同组成材料界面带阶存在而产生的限制势。然后将哈密顿量 $[H_0(k_\square, p_z) + U(z) - E(k_\square)]$ 写成 p_z 的多项式形式, 将 p_z 替换为 $-i\hbar\partial/\partial z$, 再通过传输矩阵方法^[13], 或有限元方法^[14], 或有限差分方法^[15] 就可以求出方程的本征能量和本征矢, 即可得到超晶格的能带结构(包括能量色散关系与波函数)。

1.2 态密度与费米能级计算

半导体能态密度的意义是在能量间隔 $E \sim E + dE$ 范围内允许量子态数目, 也就是允许的 k 值的数目。计算态密度, 也就是对波矢 k 的积分转换为对能量 E 的积分, 可以通过下面的关系完成^[16]:

$$\int_{E_c}^{\infty} D(E) dE \leftrightarrow 2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \quad (6)$$

式中: $D(E)$ 就是态密度。为了简化超晶格的态密度计算, 计算时我们做了一个轴近似, 即假设在 (k_x, k_y) 平面内, 以 $2\pi k_x$ 为半径的圆上的能量相同。通过轴近似, 在求解态密度时, 我们仅需要在 (k_x, k_z) 组成的空间内, 找得到满足能量在 E 到 $E + dE$ 范围内的 k 点的个数, 然后乘以 $2\pi k_x$ 就是所有允许的能量状态数。在完成计数后, 除以 dE , 然后乘以 $2 \frac{dk_x dk_z}{(2\pi)^3}$, 即可得到相应能量的态密度。

费米能级和掺杂浓度的关系可以通过下式求得:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E) D(E) dE \quad (7)$$

$$p = \int_{E_c}^{\infty} (1 - f(E)) D(E) dE \quad (8)$$

式中: $f(E) = 1 / \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right]$ 是费米狄拉克分布; E_F 是费米能级; k_B 是玻尔兹曼常数。

2 结果与分析

2.1 不同周期厚度 InAs/GaSb 超晶格的带隙

在长波超晶格吸收层设计中, 主要采用的是 13 MLs~15 MLs 的 InAs 和 7 MLs 的 GaSb 周期结构设计^[6-8]。在超晶格有效带隙的设计中, 主要是通过改变 InAs 层的厚度调节导带底的位置来设计超晶格的有效带隙, GaSb 层厚度对价带顶位置的影响相较于 InAs 层对导带底的影响要小得多。因此, 我们主要计算 GaSb 层厚度为 7 MLs, 而改变 InAs 层厚度的结果。

由于 InAs 层和 GaSb 层界面处没有公共原子, 在界面处可以形成类 InSb 和类 GaAs 两种界面, 在具体长波超晶格设计中, 引入类 InSb 界面有利于减小超晶格的总的晶格失配, 提高材料的晶体质量^[17]。因此在能带计算时, 我们在 InAs-on-GaSb 界面和 GaSb-on-InAs 界面都引入 1 ML 的 InSb。不同 InAs 层厚度的超晶格有效带隙结果如图 1 所示。为了验证模型的有效性, 图 1 中同时给出了美国西北大学^[6]、美国喷气推进实验室^[7]和以色列 SCD 公司(包括其计算结果)^[8]超晶格红外探测器截止波长所对应的能量(与有效带隙相对应)。从图中可以看出不论是探测器截止能量测试结果, 还是 SCD 的计算结果与我们的计算结果都很接近。从结果可以看出, 超晶格的有效带隙随着 InAs 层厚度的增加而减小, 并且 InAs 层厚度的改变对有效带隙的影响很大, 因此在超晶格材料外延生长过程中, 需要对周期中 InAs 层厚度进行精确地控制。此外, 通过计算我们还发现, InSb 界面的厚度同样对超晶格有效带隙影响很大, 因此界面的控制在实际生长过程中同样重要。带隙随 InAs 层厚度变化关系的计算结果可以为 InAs/GaSb 超晶格吸收层截止波长的设计提供一定参考。

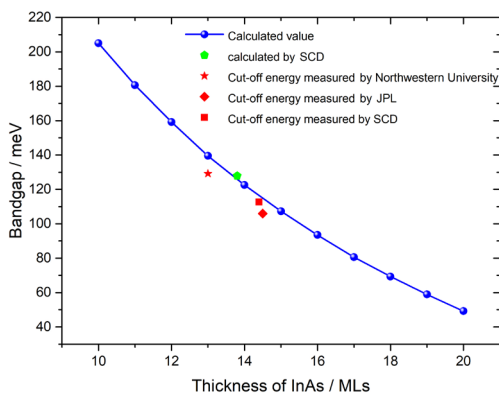


图1 InAs/GaSb 超晶格带隙随 InAs 层厚度的关系

Fig.1 Variation of band gap of InAs/GaSb superlattice with respect to InAs layer thickness.

从图 1 结果可知, 14 MLs InAs/7 MLs GaSb 的周期结构设计比较接近于 10 μm 的截止波长。因此, 我们将重点关注这个结构。计算结构的能带带阶排列如图 2 所示。图 3 则给出了 14 MLs InAs/7 MLs GaSb 结构超晶格的能带色散关系计算结果, 图 3(a)和图 3(b)分别是沿着面内和生长方向([001]方向)的色散关系, 图中的能量原点为 GaSb 价带顶。从图 3 中可以得到超晶格导带(微带)底的能量值为 0.0701 eV, 而价带(微带)顶的位置为 -0.0534 eV, 有效带隙为 0.1235 eV。导带底和价带顶的位置可以用于异质界面处带阶的计算, 因此对于势垒型超晶格红外探测器结构设

计非常关键。

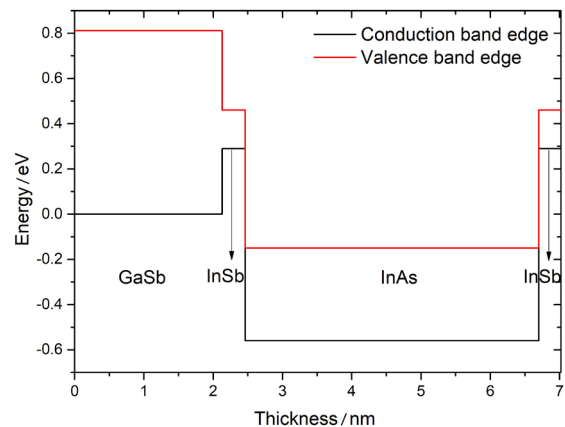


图2 7 MLs GaSb/ 1 ML InSb/ 14 MLs InAs/ 1 ML InSb 能带带阶排列

Fig.2 Band edge alignment of 7 MLs GaSb/ 1 ML InSb/ 14 MLs InAs/ 1 ML InSb

图 4 是给出了 14 MLs InAs/ 7 MLs GaSb 超晶格在单周期内 Γ 点的波函数。由图中可以看到电子波函数主要集中在 InAs 层中, 空穴主要集中在 GaSb 层中。但是部分电子 E1 波函数通过隧穿作用进入了 GaSb 层, 在整个 GaSb 层中电子 E1 波函数都不为零。轻空穴 LH1 的波函数同样隧穿到整个 InAs 层中, 而重空穴 HH1、HH2 波函数在界面附近很快降低为零, 表明重空穴主要局域在 GaSb 层中。这主要与载流子有效质量相关, 载流子有效质量越大, 隧穿几率越小。电子空穴的波函数交叠主要集中在界面和 GaSb 层中, 说明光学跃迁(吸收)重点发生在界面和 GaSb 层中。结果表明了界面对光学吸收的重要性。

2.2 M 结构超晶格能带

在势垒型探测器结构中, 采用的势垒都是单极势垒, 就是仅阻挡一种载流子通过, 而允许另一种载流子通过。阻挡空穴通过的势垒称为空穴势垒, 阻挡电子通过的称为电子势垒。对于空穴势垒, 设计原则就是通过能带计算调平吸收层与势垒层之间的导带带阶(带阶为零), 而使得势垒层相对于吸收层在价带上存在一个足够大的带阶。前面已经知道, InAs 层的厚度主要影响的是超晶格导带底的位置, 对价带顶的影响很小, 因此很容易通过减小 InAs 层的厚度获得电子势垒。而通过改变 GaSb 层的厚度来调节价带顶位置的效果并不理想, 并且改变 GaSb 层的厚度, 对导带顶也会产生影响。所以, 并不能用 InAs/GaSb 超晶格材料设计空穴势垒。目前常用于空穴势垒层设计的主要有 InAs/AlSb 超晶格和 M 结构超晶格(InAs/GaSb/AlSb/GaSb 超晶格)。两种结构都是通过 AlSb 调节超晶格的价带位置, 区别在于一个是直接采

用 AlSb 和 InAs 构成超晶格，另一个是在传统 InAs/GaSb 超晶格中插入 AlSb 层。M 结构超晶格用于空穴势垒的优势在于，在采用 M 结构超晶格势垒的探测器材料生长过程中仅考虑 InAs/GaSb 的界面即

可，不需要再考虑 InAs/AlSb 界面，降低生长难度。因此，本文重点关注美国西北大学用于长波探测器结构的 M 结构超晶格。

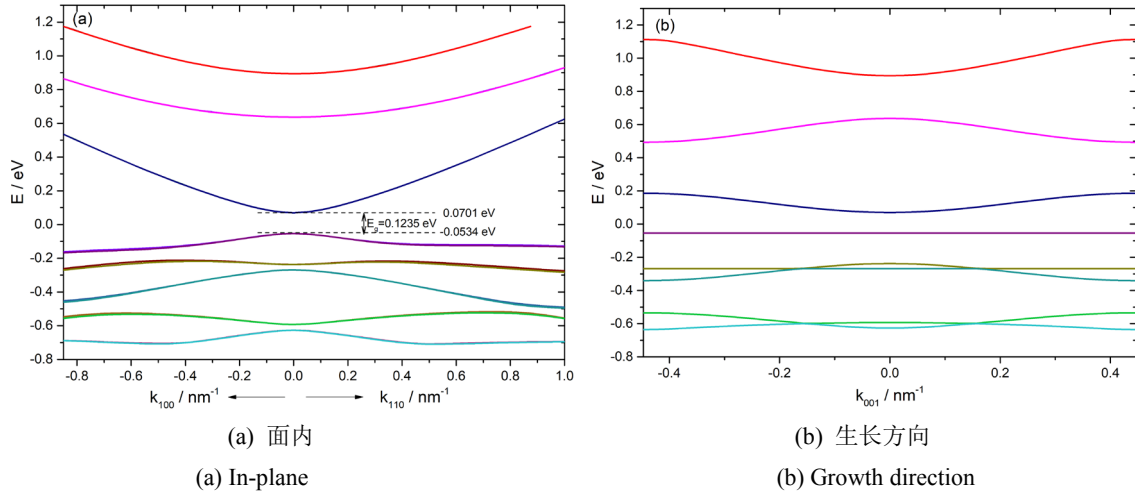


图3 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格的能带色散关系，能量原点为 GaSb 体材料的价带顶

Fig.3 Energy band dispersion of 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb superlattice, the energy origin is set as the top of GaSb valence band

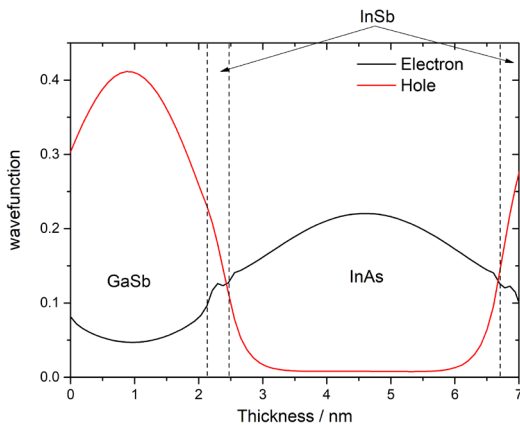


图4 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格在单周期内的波函数
Fig.4 Wave function of 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb superlattice in unit cell

为了得到 InAs/GaSb 超晶格与 M 结构超晶格之间的能带带阶，对周期结构为 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs 的 M 结构超晶格的能带结构进行了计算，同样在两个 InAs 与 GaSb 之间的界面各加入 1ML 的 InSb 界面，周期结构的能带带阶排列如图 5 所示。图 6 则给出了 M 结构超晶格的能带色散关系计算结果，图 6(a)和图 6(b)分别是沿着面内和生长方向 ([001]方向) 的能带色散关系，图中的能量原点为 GaSb 价带顶。从图 3 中可以得到超晶格导带 (微带) 底的能量值为 0.0612 eV，而价带 (微带) 顶的位置为 -0.1521 eV，有效带隙为 0.2133 eV。为了方便比较，表 1 列出了 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格和 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs M 结构超晶格

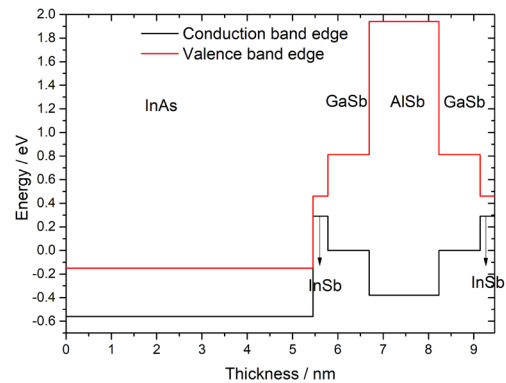
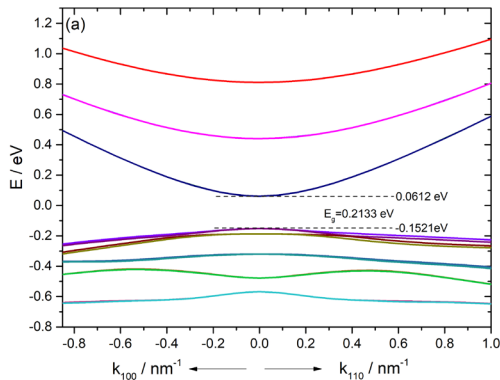


图5 18 MLs InAs / 1 ML InSb / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs GaSb / 1 ML InSb 能带带阶排列
Fig.5 Band edge alignment of 18 MLs InAs / 1 ML InSb / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs GaSb / 1 ML InSb

晶格的关键能带参数，其中 ΔE_c 和 ΔE_v 分别是 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs M 结构超晶格相对于 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格的导带带阶和价带带阶，“-”表示 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs M 结构超晶格能带值低于 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格。由表 1 得到 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs M 结构超晶格与 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格之间的导带带阶和价带带阶分别为 8.9 meV 和 98.7 meV，与美国西北大学得到的 10 meV 和 95 meV 结果非常接近^[6]。虽然在导带存在 8.9 meV 的带阶，但是 InAs/GaSb 超晶格高于 M 结构超晶格，并不会阻碍电子的运动。

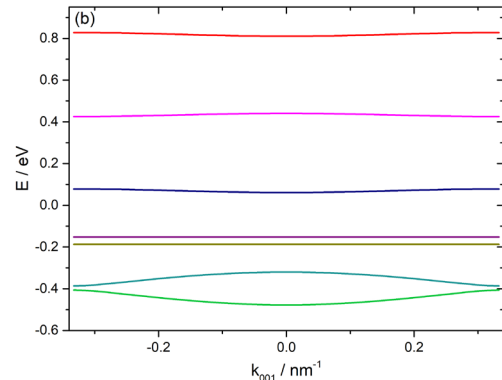
2.3 InAs/GaSb 超晶格和 M 结构超晶格掺杂浓度与费米能级位置之间的关系

为了计算掺杂浓度与费米能级位置之间的关系,



(a) 面内

(a) In-plane



(b) 生长方向

(b) Growth direction

图6 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs GaSb M 结构超晶格的能带色散关系, 能量原点为 GaSb 体材料的价带顶
Fig.6 Energy band dispersion of 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs GaSb M structure superlattice, the energy origin is set as the top of GaSb valence band

表1 14 MLs InAs/ 7 MLs GaSb 超晶格和 18 MLs InAs/ 3 MLs GaSb/ 5 MLs AlSb/ 3 MLs M 结构超晶格的关键能带参数

Table 1 Critical energy band parameter of 14 MLs InAs/ 7 MLs GaSb superlattice and 18 MLs InAs/ 3 MLs GaSb/ 5 MLs AlSb/ 3 MLs M structure superlattice

Structure	Effective energy gap (E_g)/eV	Bottom of conduction band (E_c)/eV	Top of valence band (E_v)/eV	ΔE_c /meV	ΔE_v /meV
14 MLs InAs/ 7 MLs GaSb superlattice	0.1235	0.0701	-0.0534	--	--
18 MLs InAs/ 3 MLs GaSb/ 5 MLs AlSb/ 3 MLs M structure superlattice	0.2133	0.0612	-0.1521	-8.9	-98.7

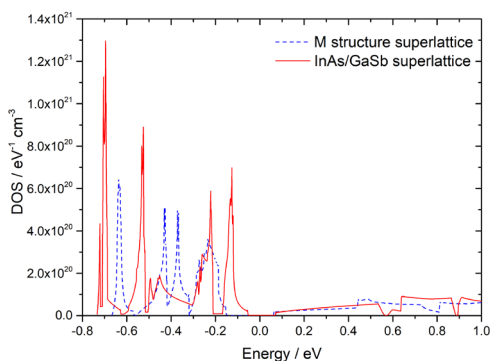


图7 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格和 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs GaSb M 结构超晶格的态密度
Fig.7 The density of states for 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb superlattice and 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs GaSb M structure superlattice

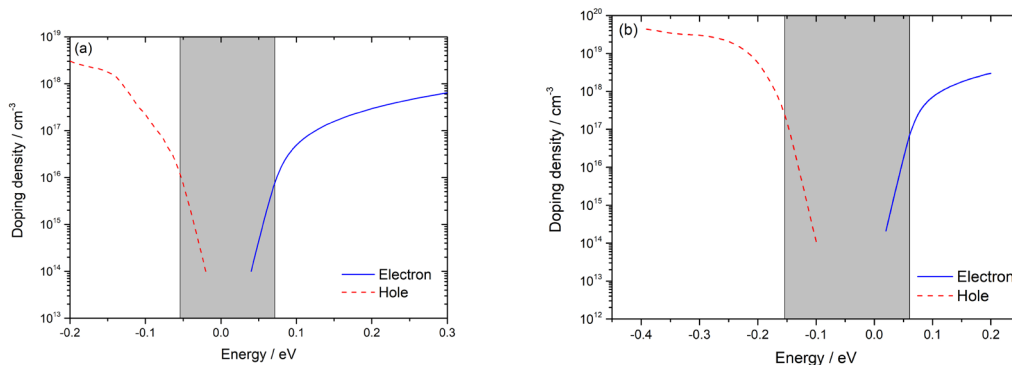
通过态密度我们进一步计算了 InAs/GaSb 超晶格和 M 结构超晶格掺杂浓度与费米能级位置的关系, 如图8所示, 其中图8(a)是 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格的结果, 图8(b)是 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5

我们首先计算了传统 14 MLs InAs / 7 MLs GaSb 超晶格和 18 MLs InAs / 3 MLs GaSb / 5 MLs AlSb / 3 MLs GaSb M 结构超晶格的态密度, 如图7所示。

MLs AlSb / 3 MLs GaSb M 结构超晶格的结果。一旦我们知道各层材料中的费米能级位置, 我们可以将其用于建立实空间的能带图, 判断两种超晶格材料形成异质 pn 结时是否存在势垒。通过费米能级与掺杂浓度之间的关系, 可以在已知掺杂浓度的情况下得到器件各层的费米能级位置, 进而优化器件性能。

3 小结

本文以美国西北大学 P- π -M-N 长波超晶格红外探测器结构为基础, 利用 k-p 方法对其中的 π 吸收层和 M 势垒层的超晶格的能带进行计算。首先, 计算了吸收层 InAs/GaSb 超晶格带隙随周期厚度的变化, 得到 14 MLs InAs/7 MLs GaSb 结构的超晶格的带隙为 0.135 eV, 可用于长波吸收层设计。然后, 计算出长波 P- π -M-N 探测器结构中常用的 M 结构超晶格的能带, 得到 18 MLs InAs/3 MLs GaSb/5 MLs AlSb/3 MLs GaSb M 结构超晶格的带隙为 0.2133 eV, 并且得到 M



(a) 14 MLs InAs/7 MLs GaSb 超晶格结果 (b) 18 MLs InAs/3 MLs GaSb/5 MLs AlSb/3 MLs GaSbM 结构超晶格结果
(a) 14 MLs InAs/ 7 MLs GaSb superlattice (b) 18 MLs InAs/3 MLs GaSb/5 MLs AlSb/3 MLs GaSb M structure superlattice

图 8 掺杂浓度与费米能级位置之间的关系

Fig.8 The relationship between doping density and Fermi energy level

超晶格势垒层与吸收层之间的导带带阶和价带带阶分别为 8.9 meV 和 98.7 meV, 适用于空穴势垒层的设计。最后, 在能带结构基础上, 计算 π 吸收层和 M 结构势垒层的态密度, 进而计算载流子浓度 (掺杂浓度) 与费米能级的关系。以上结果可为超晶格器件结构设计提供参考。

参考文献:

[1] Rhiger D R. Performance Comparison of Long-Wavelength Infrared Type II Superlattice Devices with HgCdTe[J]. *J. Electron Mater.*, 2011, **40**: 1815.
 [2] Sai Halasz G A, Tsu R, Esaki L. A new semiconductor superlattice[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1977, **30**: 651.
 [3] Smith D L, Mailliot C. Proposal for strained type II superlattice infrared detectors[J]. *J. Appl. Phys.*, 1987, **62**: 2545.
 [4] Youngsdale E R, Meyer J R, Hoffman C A, et al. Auger lifetime enhancement in InAs-Ga_{1-x}In_xSb superlattices[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **64**: 3162.
 [5] Rogalski A, Martyniuk P, Kopytko M. InAs/GaSb type-II superlattice infrared detectors: Future prospect[J]. *Appl. Phys. Rev.*, 2017(4): 031304.
 [6] Nguyen B M, Hoffman D, Delaunay P Y, et al. Dark current suppression in type II InAs/GaSb superlattice long wavelength infrared photodiodes with M-structure barrier[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, **91**: 163511.
 [7] Gunapala S D, Ting D Z, Hill C J, et al. Demonstration of a 1024 × 1024 Pixel InAs-GaSb Superlattice Focal Plane Array[J]. *IEEE Photon. Technol. Lett.*, 2010, **22**: 1856.
 [8] Klipstein P C, Avnon E, Benny Y, et al. InAs/GaSb Type II superlattice barrier devices with a low dark current and a high quantum

efficiency[C]//*Proc. of SPIE*, 2014, **9070**: 90700U.
 [9] Vurgaftman I, Aifer E H, Canedy C L, et al. Graded band gap for dark-current suppression in long-wave infrared W-structured type-II superlattice photodiodes[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, **89**: 121114.
 [10] XU W, LI L L, DONG H M, et al. Band hybridization and spin-splitting in InAs/AlSb/GaSb type II and broken-gap quantum wells[J]. *J. Appl. Phys.*, 2010, **108**: 053709.
 [11] CHUANGS L. *Physics of Photonic Devices*[M]. New York: Wiley, 2nd ed. 2009.
 [12] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys[J]. *J. Appl. Phys.*, 2001, **89**: 5815.
 [13] Shun Lien Chuang. Efficient band-structure calculations of strained quantum wells[J]. *Phys. Rev. B*, 1991, **43**: 9649.
 [14] Nakamura K, Shimizu A, Koshiba M, et al. Finite-element analysis of the miniband structures of semiconductor superlattices with arbitrary periodic potential profiles[J]. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1991, **27**: 2053.
 [15] Chuang S L, Chang C S. A band-structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors[J]. *Semicond. Sci. Technol.*, 1997, **12**: 252.
 [16] Davies J H. *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
 [17] Frank Fuchs, N Herres, J Schmitz, et al. InAs/GaSb superlattices characterized by high-resolution x-ray diffraction and infrared optical spectroscopy[C]//*Proc. of SPIE*, 1996, **70**: 2554.