

Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15}量子阱发光结构设计

黄诗浩^{1,2}, 李磊毅³, 谢文明^{1,2}, 汪涵聪^{1,2}, 陈炳煌^{1,2}

(1.福建工程学院 信息科学与工程学院, 福建 福州 350118;

2.福建工程学院 电子信息与电气技术国家级实验教学示范中心, 福建 福州 350118;

3.福建工程学院 海峡工学院, 福建 福州 350118)

摘要: 提出了采用 Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15}量子阱结构制备 Ge 材料直接带隙发光器件的设计方法。基于量子力学理论,设计得到不同量子阱宽度下的能级分布情况以及载流子在 Γ_1 -HH1 之间的复合随量子阱宽度的变化趋势。设计结果给出了具体的能级与波函数的分布情况,可为实验制备 Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15}量子阱发光器件提供理论指导。

关键词: 锗硅; 锗; 量子阱; 发光; 设计

中图分类号: O47

文献标志码: A

文章编号: 1672-4348(2017)04-0333-05

Structural design of Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} quantum well for light emitting

Huang Shihao^{1,2}, Li Lei³, Xie Wenming^{1,2}, Wang Hancong^{1,2}, Chen Binhuang^{1,2}

(1.College of Information Science and Engineering, Fujian University of Technology, Fuzhou 350118, China;

2.National Demonstration Center for Experimental Electronic Information and Electrical Technology Education, Fujian University of Technology, Fuzhou 350118, China;

3.Straits College of Engineering, Fujian University of Technology, Fuzhou 350118, China)

Abstract: The design method of utilizing Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} quantum well structure to prepare silicon photonic materials with gaps for light emitting was presented. The distribution of quantum energy levels under different widths of quantum well and light emitting of the light carrier composite at (from) Γ_1 -HH1 transition at various widths of the quantum well were obtained based on quantum mechanics theory. The distribution of the specific energy levels and wave functions was illustrated, which would provide theoretical guidance for the preparation of Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} quantum well light-emitting devices.

Keywords: germanium (Ge) silicon; Ge; quantum well; emission; design

量子阱具有准二维特性和量子尺寸效应,在光电子器件领域发挥了重要的作用。锗硅材料构成的量子阱不仅具有优良的光电性能,而且与成熟的硅 CMOS 工艺相兼容,在生产上具有成本优势,成为制备高性能硅基光电子器件的重要材料。由于硅是间接带隙材料,其发光效率低,从而制约

了硅基光电集成电路的发展。目前提高硅基材料发光效率的方法主要有纳米工程^[1]、能带改性硅基锗工程^[2]、量子阱工程^[3]等。对于 Ge/Ge_xSi_{1-x}量子阱结构,通过合理的能带设计,有目的地限制载流子,实现载流子的局域化,能够提高其发光效率,进而运用于光电集成电路中。

收稿日期: 2017-05-04

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61604041);福建省自然科学基金资助项目(2016J05147);福建工程学院科研基金项目(GY-Z14073)

通讯作者: 黄诗浩(1985-),男,福建三明人,讲师,博士,研究方向:硅基光电子材料与器件。

目前,对 $\text{Ge}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 量子阱的研究主要是通过 在 Ge 衬底上外延高锗组分的 $\text{Ge}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x > 0.7$) 量子阱,研究其光电性质。该量子阱结构常被称为 I 型量子阱,即电子和空穴被束缚在同一层锗材料中。该结构不仅具有强的波函数交叠率和振子强度,而且两种材料的界面构成的带阶在导带和价带分布较平均,对电子和空穴的限制作用有效,能够提高载流子的辐射复合速率,因此高锗组分的 $\text{Ge}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 量子阱更引人关注。

2005 年, Nature^[4] 首次报道了 Ge 量子阱的室温下直接带跃迁电吸收谱,并制备了性能与 III-V 材料可媲美光电调制器。2008 年, Bonfanti 等研究人员^[5] 报道了高锗组分的 $\text{Ge}/\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 量子阱直接带低温光致发光谱。2011 年 Chaisakul^[6] 研究小组, 2012 年中国科学院研究小组^[7] 先后制备了 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 多量子阱波导结构,成功观测到室温下锗的直接带隙电致发光光谱。2016 年厦门大学硅基光电子材料与器件研究小组^[3] 制备了张应变 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.87}\text{Si}_{0.13}$ 多量子阱发光器件,观测到来自 Ge 量子阱内 Γ_1 -HH1 以及 Γ_2 -HH2 不同能级发出的红外光,并且随着电流的加大,还观测到了 Ge 衬底的直接带隙发光现象。虽然在 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 多量子阱方面已经取得了一些良好的成果,但是,由于高质量外延材料的制备难度相对较高,研究进展相对缓慢。本文从理论上对 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱发光结构进行设计,为高质量 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱材料的外延提供相应的理论指导。

1 量子阱发光模型

1.1 量子阱发光结构

实现 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱的生长可以利用超高真空化学汽相沉积系统,在 Si 衬底上依次外延低温 Ge 缓冲层、高温 Ge 层,然后以此外延的 Ge 材作为新的衬底继续外延生长 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱材料;其中 Si 与 Ge 的失配位错大部分可以被限制在低温 Ge 缓冲层中,外延得到的 Ge 材料及 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱材料可以有较底的位错密度。其结构示意图如图 1(a) 所示,具体生长过程可以参考文献[8-9]。

$\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱结构的能带模型如图 1(b) 所示。类似于 Ge 材料的能带结构, $\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 材料导带最小值也是位于沿布里渊区 $\langle 111 \rangle$ 方向

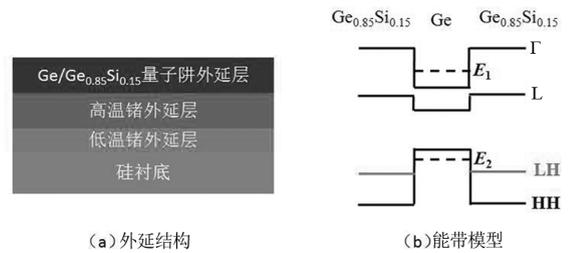


图 1 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱结构示意图

Fig.1 The structure of $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ quantum well:

(a) epitaxy structure; (b) energy belt model

的边界处 L 点,导带次小值位于 $k=0$ 处的 Γ 点。由于两种材料电子亲和势能不一样,因此,在 Ge 与 $\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 界面处形成了能带带差,两边的 $\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 材料作为势垒层对有源层量子阱 Ge 材料进行载流子限制。对于有源层 Ge 势阱,由于间接带 L 点处的电子与价带空穴发生辐射复合的概率低,而室温下会有一定的电子分布于直接带 Γ 点,这部分电子具有较高的辐射复合概率,因此 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱的发光主要是导带直接带 Γ 点形成的能级 E_1 处的电子与价带形成的能级 E_2 处的空穴发生复合发光。为了简化设计,在发光结构的设计过程中,对于导带部分,仅考虑直接带 Γ 点形成的能级。 E_1 与 E_2 的能级差决定了发光的波长, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱材料作为光电集成芯片的运用,希望设计得到 $1.55 \mu\text{m}$ 光通信波段附近的红外光。

1.2 量子阱数学建模

由量子力学知识可知, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.85}\text{Si}_{0.15}$ 量子阱属于一种典型的有限深方势阱。建立如图 2 所示的数学模型,则一维定态条件下的 Schrödinger 方程为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

式中 $\hbar = h/(2\pi)$, h 为普朗克常数, m 为载流子有效质量, $V(x)$ 为势能函数, $\psi(x)$ 为能量本征函数, E 为能量本征值。

设有限深方势阱的势能函数为:

$$V(x) = \begin{cases} V, & x < 0 \\ 0, & 0 < x < a \\ V, & x > a \end{cases} \quad (2)$$

则势阱内区域 ($0 < x < a$), Schrödinger 方程为:

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0 \quad (3)$$

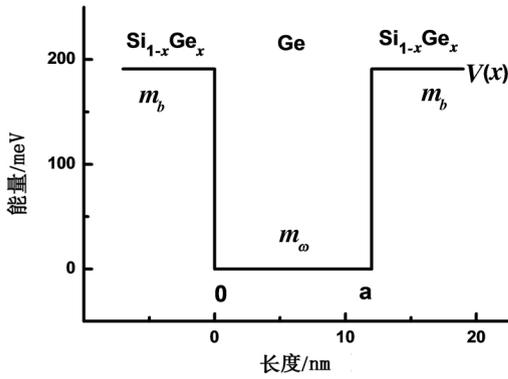


图2 有限深方势阱模型

Fig.2 Finite depth confining well model

式中 $k = \frac{\sqrt{2m_\omega E}}{\hbar}$, m_ω 为阱内材料的载流子的有效质量,该微分方程的通解为:

$$\psi(x) = A_1 \sin kx + A_2 \cos kx, \quad 0 < x < a \quad (4)$$

势阱外区域 ($x < 0, x > a$), Schrödinger 方程为:

$$\psi''(x) - \beta^2 \psi(x) = 0 \quad (5)$$

式中 $\beta = \frac{\sqrt{2m_b(V-E)}}{\hbar}$, m_b 为阱外材料的载流子的有效质量,其通解为:

$$\psi(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x} \quad (6)$$

由束缚态的边界,当 $|x| \rightarrow \infty$ 时,波函数 $\psi(x) \rightarrow 0$,因此波函数的解的形式为:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\beta x}, & x < 0 \\ A_1 \sin kx + A_2 \cos kx, & 0 < x < a \\ Be^{-\beta x}, & x > a \end{cases} \quad (7)$$

根据波函数及其导数在边界处连续的边界条件:

$$\begin{aligned} \psi(x) \Big|_{x=0^-} &= \psi(x) \Big|_{x=0^+} \\ \psi'(x) \Big|_{x=0^-} &= \psi'(x) \Big|_{x=0^+} \\ \psi(x) \Big|_{x=a^-} &= \psi(x) \Big|_{x=a^+} \\ \psi'(x) \Big|_{x=a^-} &= \psi'(x) \Big|_{x=a^+} \end{aligned} \quad (8)$$

可得波函数:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\beta x}, & x < 0 \\ \frac{\beta}{k} A \sin kx + A \cos kx, & 0 < x < a \\ A \left[\frac{\beta}{k} \sin(ka) + \cos(ka) \right] e^{\beta(a-x)}, & x > a \end{cases} \quad (9)$$

此时波函数虽然不归一,但可以看出方程组之间的通过未知数 A 衔接,方程组的未知数只有 A ,不妨取 $A = 1$,再利用 $\psi / \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx}$ 计算方法进行归一化。

根据波函数及其导数的连续性,得到能量本征值 E 的关系为:

$$\tan(ka) = \frac{k^2 - \beta^2}{2\beta k} \quad (10)$$

将 $k = \frac{\sqrt{2m_\omega E}}{\hbar}$ 与 $\beta = \frac{\sqrt{2m_b(V-E)}}{\hbar}$ 的表达式代入上述方程中,即得:

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2m_\omega E}}{\hbar} a\right) = \frac{2\sqrt{m_\omega m_b E(V-E)}}{m_\omega E - m_b(V-E)} \quad (11)$$

求解此超越方程,即能得到势阱内载流子的能量本征值。

2 计算结果与分析

Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} 量子阱的理论参数如表 1 所示,表中 m_0 为静止电荷质量, m_ω 、 m_b 分别代表量子阱内 Ge 材料的有效质量和量子阱外 Ge_{0.85}Si_{0.15} 势垒的有效质量。

表1 Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15}量子阱的理论参数Tab.1 The theoretical parameter of Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} quantum well

参数	导带 Γ 带	价带 LH 带	价带 HH 带
势能/eV	0.191	0.071	0.103
m_ω	0.038 m_0	0.042 m_0	0.345 m_0
m_b	0.061 m_0	0.058 m_0	0.372 m_0

图 3 为导带量子阱阱宽与阱内能级之间的关系。从图 3 可以看出, Γ 能带量子阱阱内能量本征值随着阱宽的增加而减小,最多能存在 3 个能级。 Γ_1 能级在阱宽为 7 nm 前下降较快,在 7 nm 后下降缓慢。当阱宽增加到 8 nm 时,出现第 2 个能级 Γ_2 ,增加到 15 nm 时,出现第 3 个能级 Γ_3 ,大约每增加 7 nm 出现一个新能级。

图 4 表示为价带量子阱阱宽与阱内能级之间的关系。从图 4(a) 可知,LH 能带的能量本征值随着阱宽的增加而减小,最多能存在 2 个能级。当阱宽为 12 nm 时,出现第 2 个能级。从图 4(b)

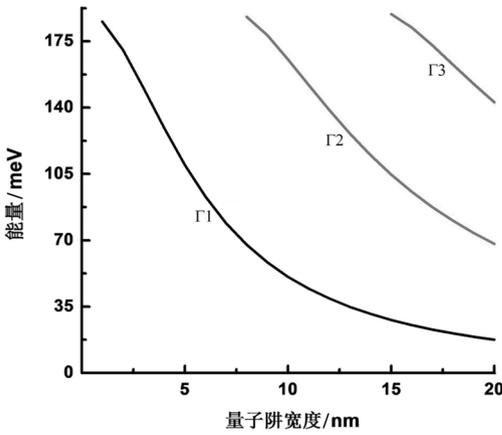
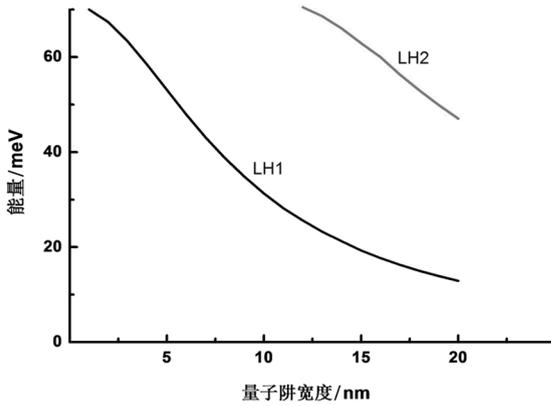
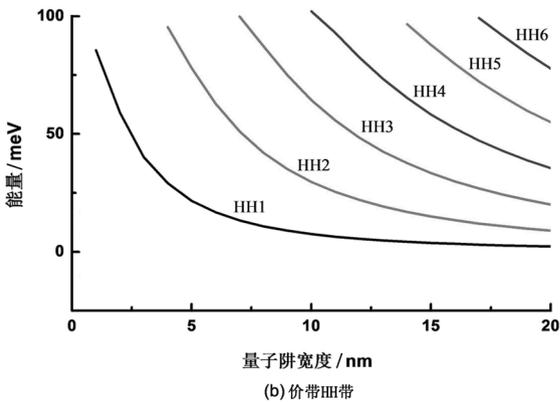


图 3 导带量子阱阱宽与阱内能级之间的关系

Fig.3 Relation between the width of a conduction band quantum well and the energy level within the well



(a) 价带 LH 带



(b) 价带 HH 带

图 4 量子阱阱宽与阱内能级之间的关系

Fig.4 Relation between the width of a quantum well and the energy level within the well; (a) LH band; (b) HH band

中可以看出,HH 能带的能量本征值随着阱宽的增加而减小,最多能存在 6 个能级。在同样阱宽的条件下,HH 能带比 LH 能带与 Γ 能带的能级多,这是因为重空穴能带的有效质量比其他两个能带大一个数量级。可以看出,大约每增加 3 nm 出现一个新的能级。

图 5 给出了典型的 12nm Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} 量子阱各能级及相应波函数的分布情况。电子在导带上的 Γ 能带中存在的能级为 Γ_1 和 Γ_2 ,在价带的 LH 能带中存在的能级为 LH1 和 LH2,在 HH 能带中只绘出了能级 HH1 和 HH2 及其波函数情况。从图 5 波函数分布可知大部分载流子分布于基态能级。

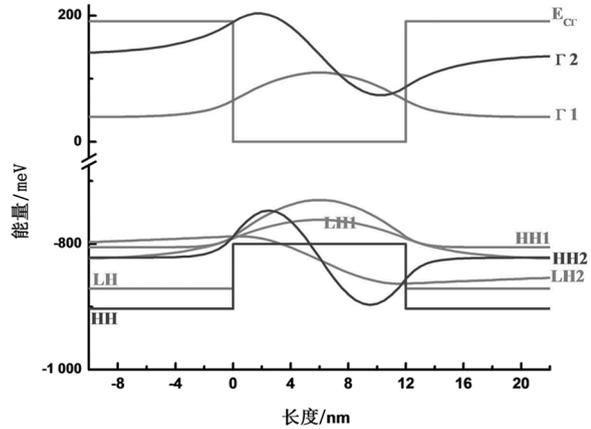


图 5 典型的 12 nm Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} 量子阱各能级及相应波函数的分布情况

Fig.5 Distribution of energy levels and wave functions of typical 12 nm-Ge/Ge_{0.85} Si_{0.15} quantum well

由于大部分载流子分布于基态能级,处于导带基态能级的电子与处于价带基态能级的空穴复合情况如图 6 所示。从图 6 可知,阱宽在 1.5 nm 之前,量子阱内载流子的跃迁主要是导带 Γ_1 能级到价带轻空穴 LH1 之间的跃迁;阱宽大于 1.5 nm 后,量子阱内载流子的跃迁主要是导带 Γ_1 能级到重空穴 HH1 之间的跃迁,随着阱宽的增大,跃迁能级减小,即发光波长增大。

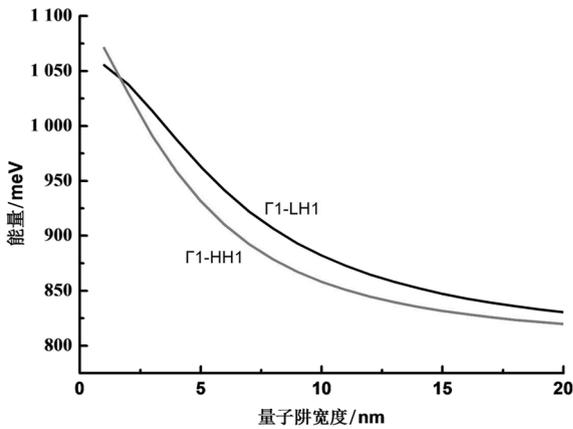


图6 载流子在 Γ_1 -HH1, Γ_1 -LH1 跃迁与量子阱宽的关系

Fig.6 Energy variation of Γ_1 -HH1, Γ_1 -LH1 (Energy variation of Γ_1 -HH1, Γ_1 -LH1 transitions) vs quantum (Ge) well width

3 结论

量子阱发光器件具有复合效率高、产生的光波长可调等特点。本研究采用有限深量子阱模型对 Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} 量子阱的相关参数进行设计,该模型具有物理图像清晰,计算方便,结果准确等优点。通过设计不同的量子阱宽度,能够实现对 1.17~1.55 μm 范围内红外光发射波长的调制,当量子阱宽大于 1.5 nm 后,量子阱内载流子的跃迁主要是导带 Γ_1 能级到重空穴 HH1 之间的跃迁。设计得到的不同阱宽下具体的能级与波函数的分布情况,可以为 Ge/Ge_{0.85}Si_{0.15} 量子阱发光结构的优化和器件性能的改善提供相关的理论指导。

参考文献:

- [1] Kawamura Y, Huang K, Thombare S, et al. Direct-gap photoluminescence from germanium nanowires[J]. Physical Review B, 2012, 86:035306-1-035306-6.
- [2] Huang S, Li C, Chen C, et al. Properties of n-Ge epilayer on Si substrate with in-situ doping technology[J]. Chinese Physics B, 2016, 25:066601-1-066601-5.
- [3] Lin G, Chen N, Zhang L, et al. Roomtemperature electroluminescence from tensile-strained Si_{0.13}Ge_{0.87}/Ge multiple quantum wells on a Ge virtual substrate[J]. Materials, 2016, 9:803-1-803-10.
- [4] Kuo Y, Lee Y, Ge Y, et al. Strong quantum-confined Stark effect in germanium quantum-well structures on silicon[J]. Nature, 2005, 437:1334-1336.
- [5] Bonfanti M, Grilli E, Guzzi M, et al. Optical transitions in Ge/SiGe multiple quantum wells with Ge-rich barriers[J]. Physical Review B, 2008, 78(4):041407-1-041407-4.
- [6] Chaisakul P, Marris D, Isella G, et al. Room temperature direct gap electroluminescence from Ge/Si_{0.15}Ge_{0.85} multiple quantum well waveguide[J]. Applied Physics Letter, 2011, 99:141106-1-141106-3.
- [7] Liu Z, Hu W, Li C, et al. Room temperature direct-band gap electroluminescence from n-type strain-compensated Ge/SiGe multiple quantum wells[J]. Applied Physics Letter, 2012, 101:231108-1-231108-4.
- [8] Chen Y, Li C, Lai H, et al. Quantum-confined direct band transitions in tensile strained Ge/SiGe quantum wells on silicon substrates[J]. Nanotechnology, 2010, 21:115207-1-115207-5.
- [9] Wu P, Huang Y, Hsu H, et al. Characterization of Ge/Si_{0.16}Ge_{0.84} multiple quantum wells on Ge-on-Si virtual substrate using piezoreflectance spectroscopy[J]. Solid State Communications, 2013, 167:5-9.

(特约编辑:黄家瑜)