

场助 InP/InGaAsP/InP 半导体光电阴极 异质结能带的计算

李晋闽* 郭里辉 王存让 张工力 侯 洵

(中国科学院西安光学精密机械研究所, 西安 710068)

提 要

采用双曲型的渐变函数, 同时考虑加偏压时引起的阴极表面空间电荷区的变化, 对场助 InP/InGaAsP/InP 半导体光电阴极异质结的能带结构进行了详细的分析和计算, 得到了在不同材料参数时, 异质结能带结构的分布曲线。计算结果指出了达到理想的异质结传输效率时, 发射层的厚度和掺杂浓度、吸收层的掺杂浓度、异质结界面处渐变区宽度以及场助偏压应满足的条件。它有助于场助半导体光电阴极的结构设计和材料参数的选择。

关键词 InP/InGaAsP/InP 异质结, 场助半导体光电阴极, 渐变函数。

1 引 言

场助半导体光电阴极对于延伸长波阈值, 提高红外波段的量子效率具有很大的潜力^[1~2]。根据理论计算与实验结果^[3], 场助半导体光电阴极的长波响应主要取决于光电子在吸收层与发射层之间异质结界面处的传输效率, 而异质结界面处及其附近的能带结构决定了电子在界面处的传输效率, 且与发射层的厚度、界面渐变区宽度以及掺杂浓度等参数有直接关系。为了获得平滑的导带分布形状, 达到高的异质结传输效率, 至少要满足三个条件: 首先, 在异质结界面处不能有高密度的电子陷阱; 其次, 发射层的厚度和掺杂浓度应使耗尽层在异质结界面处有足够高的电场以“拉平”该处的导带势垒; 第三, 异质结应该是一个渐变结。第一个条件意味着在异质结材料的生长中, 界面处应达到较好的晶格匹配, 以尽量减小由于失配位错所造成的电子陷阱。后两个条件正是本文要讨论的内容。通过文中的理论计算, 清晰地表明, 为了使光电子在穿过吸收层和发射层的界面时达到较理想的异质结传输效率, 要求发射层的厚度和掺杂浓度、吸收层的掺杂浓度、异质结界面处渐变区宽度以及场助偏压所必须满足一定的条件, 同时给出了上述参数对异质结能带的影响。

2 InP/InGaAsP/InP 异质结能带结构的计算模型

讨论的 InP/InGaAsP/InP 异质结的能带结构如图 1 所示。由于这种异质结阴极是 P 型掺杂的, 作为少数载流子的光电子的传输与发射过程均在导带中完成, 因此本文主要研究电子在导带中的输运过程。在零偏压条件下, 由于吸收层与发射层之间能带的差值, 在异

收稿日期: 1991 年 9 月 16 日; 收到修改稿日期: 1991 年 11 月 4 日

* 现在中国科学院半导体研究所工作(北京 100083)。

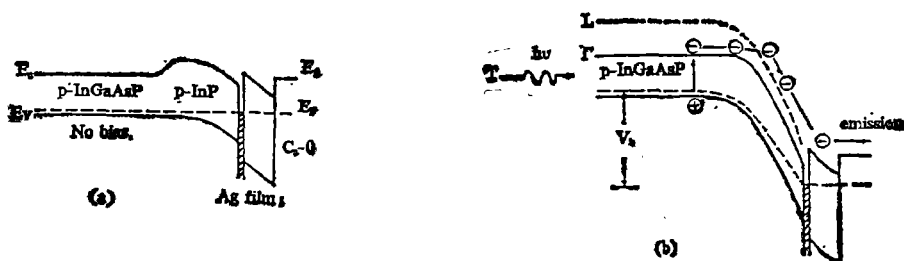


Fig. 1 Schematic energy-band diagram of InP/InGaAsP/InP heterojunction with bias (b) and without bias (a)

质结界面处有一个大约为 $E_g(\text{InP}) - E_g(\text{InGaAsP}) = 0.36 \text{ eV}$ 的导带势垒^[2]。在光电子由吸收层传输到发射层的过程中, 这个势垒无疑是非常不利的, 必须通过加在阴极表面肖特基势垒上的反向偏压所形成的耗尽场, 耗尽 InP 发射层并在异质结界面处提供足够高的电场将该势垒减小到零。这样, 场助阴极的反向偏压具有两种功能: 首先是使光电子有效地穿过异质结势垒; 其次是在发射层内使光电子跃迁到较高能级从而使其能有效地向真空中发射。

当两种不同功函数的材料形成异质结时, 将出现电荷的重新分布, 这时在异质结界面处及其附近的能带必然产生弯曲并导致能带的不连续。由于 InP 和 InGaAsP 的电子亲和势相近, 因此能带弯曲量约为 InP (1.35 eV) 和 InGaAsP (0.99 eV) 两者禁带宽度的差值; 而导带和价带在异质结界面处的不连续分别为 ΔE_c 和 ΔE_v 。对于场助异质结阴极而言, ΔE_c 对光电子在异质结处的传输是十分不利的, 因为从原理上它表示在异质结处除了存在一个由于 InP 和 InGaAsP 能带差所形成的势垒外, 还存在一个 ΔE_c 不连续的附加势垒。但是根据文献报道, 在典型的液相外延、气相外延或其它外延条件下, 由于在异质结界面处自然存在一个组分过渡区 (该区域一般为 100 nm 左右)^[4], 因此 ΔE_c 和 ΔE_v 的不连续在这个组分过渡区中基本上被平滑掉了^[5~6]。

根据以上观点, 本文在计算异质结导带曲线中, 假设 InGaAsP 吸收层与 InP 发射层之间导带曲线是连续的, 并且在界面附近由于组分是渐变的, 则带隙也是渐变的。由此引出一个渐变函数 $G(x)$, 该函数是异质结附近带隙变化的数学表述。在实际中最常用的是双曲型渐变函数, 其具体形式为^[7]:

$$G(x) = E_g(\text{InGaAsP}) + \Delta E_g \{1 - \tanh[(x - t(\text{InP}) - L/2)/L]\}. \quad (1)$$

$$\Delta E_g = E_g(\text{InGaAsP}) - E_g(\text{InP})$$

式中 $E_g(\text{InGaAsP})$ 、 $E_g(\text{InP})$ 分别为吸收层和发射层的带隙; $t(\text{InP})$ 为发射层的厚度; L 为渐变区宽度; x 为距发射层表面的距离。为了简化计算, 假设在异质结界面处的掺杂浓度是陡变的。同时在计算中, 还要考虑加偏压时引起的表面耗尽区中空间电势的变化, 即:

$$V(x) = qN_a[W(V_b) \cdot x - x^2/2]/\epsilon_r\epsilon_0 - \phi_P + V_b, \quad (2)$$

式中 q 为电荷电量; ϵ_r 为发射层的相对介电常数, ϕ_P 为 P 型肖特基势垒的高度; N_a 为掺杂浓度。耗尽区宽度 $W(V_b)$ 由下式给出:

$$W(V_b) = \{2\epsilon_r\epsilon_0[V_D - V_b - (kT/q)]/qN_a\}^{1/2}. \quad (3)$$

式中 k 为玻耳兹曼常数; T 为绝对温度; V_D 为内建电势; V_b 为所加偏压。

随着加在肖特基结上的反向偏压的增大,耗尽场逐渐由发射层表面向体内扩展,引起表面能带越来越弯曲;同时表面真空能级 E_0 也随着表面能带的弯曲而逐渐降低,甚至低于体内导带底的能级 E_c ,如图 1(b)所示. 另外对于一定的发射层厚度,选取适当的掺杂浓度,使得在某一偏压条件下,肖特基结所加的电场将发射层完全耗尽,因而在把 InGaAsP 的能带拉下来的同时,也将界面处 0.36 eV 的导带势垒拉平. 在耗尽层延伸到吸收层内时,计算空间电势 $V(x)$ 采用与(2)式相同的表达式,只是在计算时要采用对应于 InGaAsP 的材料参数.

由以上所得到的表达式,相对于体内费米能级的位置,导带随 x 变化的关系就是渐变函数与空间电势的叠加:

$$E_c(x) = G(x) + V(x). \quad (4)$$

在计算中要输入的参数为:发射层和吸收层的掺杂浓度 N_{a1} 、 N_{a2} ; 发射层厚度 t 以及渐变区宽度 L .

3 InP/InGaAsP/InP 异质结能带结构的计算结果与讨论

计算中取阴极体内费米能级的位置为势能零点; Ag 与 P 型 InP 表面形成的肖特基结势垒高度 ϕ_p 为 0.78 eV^[8]; InP 和 InGaAsP 的相对介电常数分别为 12.35 和 13.23; $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ ($x=0.25, y=0.55$) 的带隙为 0.99 eV (对应的响应阈值波长为 1.25 μm). 图 2 是根据(4)式由计算机算出的不同参数时导带曲线. 由图 2(a)可明显看出,由于在导带的异质结界面处有一个深度约为 0.15 eV 的电子势阱. 在较高偏压条件下(如 $V_b=5$ V 时)该势阱也仍然存在,它将“陷住”试图穿过异质结的电子,使电子很难由吸收层传输到发射层. 图 2(c)和(b)这两组曲线的掺杂浓度、发射层厚度都完全相同,只是渐变区宽度 L 不同. 由图 2(b)的曲线可明显看出异质结的渐变区宽度对导带形状的影响;图 2(b)还表明,当所加偏压在 3 V 到 5 V 之间时,就足以拉平导带的势垒,因此渐变区宽度 L 对平滑导带是至关重要的. 随着 L 的增大,原先相当陡峭的势阱也将变得平滑甚至完全消失(如图 2(b)中 $V_b=5$ V 时). 故在相同的工作条件下,图 2(b)比图 2(a)结构的阴极具有更高的异质结传输效率. 图 2(c)和(d)指出不同的吸收层掺杂浓度对导带的影响. 这两个图与图 2(b)除了吸收层的掺杂浓度不同外,其它参数相同. 图 2(b)吸收层的掺杂浓度为 $1 \times 10^{15}/\text{cm}^3$,而(c)和(d)则分别为 $1 \times 10^{16}/\text{cm}^3$ 和 $1 \times 10^{17}/\text{cm}^3$. 图 2(c)表明耗尽层扩展到吸收层的深度比图 2(b)要小,但是加适当的偏压(如 3 V 到 5 V),仍可将导带的势垒拉平. 而图 2(d)则表明吸收层的掺杂浓度为 $1 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ 时,即使在较高的偏压下,导带仍有一个较高的势垒,毫无疑问,这种结构的阴极材料不是我们所希望得到的. 图 2(e)和(f)是另一种情形下的导带曲线,这两个图中除发射层厚度不同外,其它材料参数完全相同. 由此可看出在掺杂浓度相同时,发射层越厚,则导带越不平滑. 另外图 2(f)与(d)相比,也可看出在别的条件相同时,发射层掺杂浓度对导带形状的影响. 由以上结果,使我们在阴极材料的结构设计,可通过选取适当的材料参数以获得最佳的导带曲线.

由于我们在计算中假设导带异质结势垒高度为 0.36 eV,因此在吸收层和发射层掺杂浓度不同时,计算结果有一定误差. 根据计算,在图 2 所讨论的掺杂浓度范围内,导带异质结

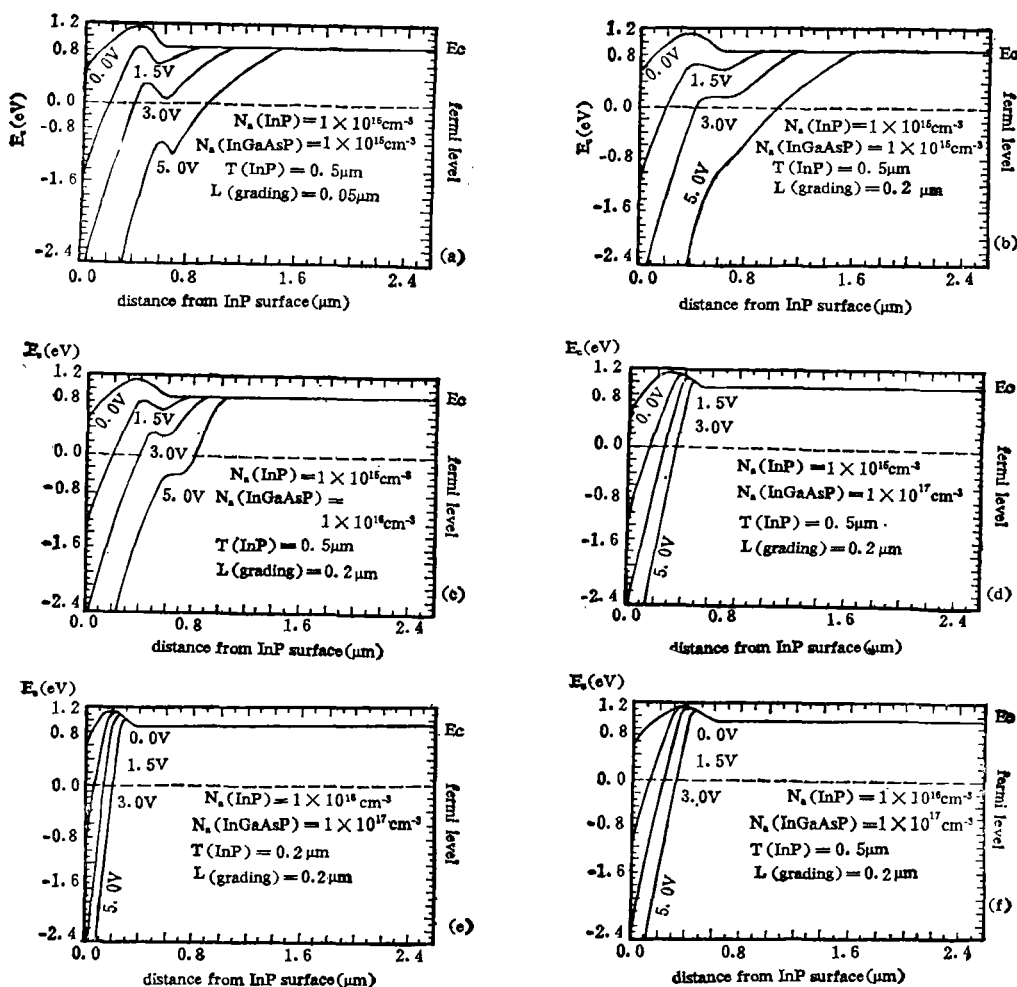


Fig. 2 Calculated curves of conduction-band profile at different parameters

(p -InP/ p -InGaAsP, $E_g(\text{InP})=1.35\text{ eV}$, $E_g(\text{InGaAsP})=0.99\text{ eV}$)

势垒高度的变化范围为 0.32 eV (图 2(d) 时) 至 0.39 eV (图 2(e) 和 (f)), 因此计算中将该势垒高度作为常量处理不会引起太大的偏差。我们根据以上计算结果, 在液相外延中通过控制生长温度及降温速率, 获得了性能较好的 InP/InGaAsP/InP 组分渐变的异质结材料及场助半导体光电阴极^[9]。

4 结 论

根据以上计算结果, 要获得好的异质结传输效率, 首先, 吸收层和发射层的掺杂浓度应尽可能低, 一般应小于 $1 \times 10^{16}/\text{cm}^3$, 这是场助半导体阴极与 GaAs 负电子亲和势光电阴极的材料参数中最显著的差别; 其次, 在其它材料参数相同时, 应保证一定的渐变区宽度, 这是与其它 InGaAsP 光电器件 (如半导体激光器) 对材料的要求完全不同的; 第三, 如发射层掺杂浓度低, 则其厚度可相应大一些, 但不宜超过 $0.5\text{ }\mu\text{m}$ 。

参 考 文 献

- [1] P. E. Gregory, J. S. Escher, R. R. Saxena *et al.*, Field-Assisted Photoemission to 2.1 Microns from a Ag/*p*-In_{0.77}Ga_{0.23}As. *Appl. Phys. Lett.*, 1980, **36**(8): 639~640
- [2] J. S. Escher, P. E. Gregory, S. B. Hyder *et al.*, Photoelectric Imaging in the 0.9~1.6 Micron Range. *IEEE Electron. Devices Lett.*, 1981, **EDL-2** (5): 123~125
- [3] 李晋闽, 场助红外半导体光电阴极的研究, 博士论文, 西安: 中国科学院西安光学精密机械研究所, 1990: 19~41
- [4] W. R. Frensley, H. Kroemer, Theory of the energy-band lineup at an abrupt semiconductor heterojunction. *Phys. Rev. (B)*, 1977, **16** (6): 2642~2652
- [5] W. A. Harrison, Elementary theory of heterojunctions. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1977, **14** (4): 1016~1021
- [6] D. T. Cheung, S. Y. Chiang, G. L. Pearson, A Simplified Model for Graded-gap Heterojunctions. *Solid-State Electron.*, 1975, **18** (3): 263~266
- [7] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*. New York: Wiley & Sons Inc., 1969: 370
- [8] J. S. Escher, R. L. Ell, P. E. Gregory *et al.*, Field-Assisted Semiconductor Photoemitters for the 1~2μm Range. *IEEE Trans Electron. Devices*, 1980, **ED-27** (7): 1244~1249
- [9] 李晋闽, 郭里辉, 张工力等. 场助 InGaAsP/InP 异质结半导体光电阴极的研究, *光学学报*, 1992, **12** (6): 528~532

Calculation of heterojunction conduction band for a field-assisted InP/InGaAsP/InP semiconductor photocathodes

LI JINMIN GUO LIHUI ZHANG GONGLI WAN CUNRAN HOU XUN

(Xi'an Institute of Optics & Precision Mechanics, Xi'an 710068)

(Received 16 September 1991; revised 4 November 1991)

Abstract

By using the hyperbolic grading function and taking account of the potential varies near the surface of photocathodes caused by an applied bias, the conduction band structures at the heterojunction interface for a field-assisted InP, InGaAsP/InP semiconductor photocathode are analysed and calculated in this paper. The profile curves of conduction band structure at the heterojunction interface with the different parameters of materials have been obtained. In order to achieve the perfect transmission efficiency at heterojunction, the calculation results have shown the conditions for the thickness and the doping concentration of the emission layer, the doping concentration of the absorption layer, as well as the grading width at the heterojunction interface and the applied bias. The results are helpful to designing field-assisted semiconductor photocathode and choosing material parameters.

Key words InP/InGaAsP/InP heterojunction, field-assisted semiconductor photocathode, grading function.