

# GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 半导体量子阱光辐射-热离子制冷<sup>\*</sup>

韩 鹏<sup>1)</sup> 金奎娟<sup>1)†</sup> 周岳亮<sup>1)</sup> 周庆莉<sup>1)</sup> 王 旭<sup>1)</sup> 赵嵩卿<sup>1)</sup> 马中水<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>中国科学院物理研究所,北京凝聚态物理国家实验室,北京 100080)

<sup>2)</sup>北京大学物理学院,北京 100871)

(2005 年 1 月 27 日收到,2005 年 2 月 28 日收到修改稿)

采用数值计算方法分析了 GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 半导体量子阱的光辐射-热离子制冷. 以漂移-扩散模型为基础,通过电流连续性方程和泊松方程自洽地计算出在外加正向偏压的条件下半导体内部的载流子分布情况,并在此基础上计算了阱内载流子的发光复合和俄歇复合,从而确定了半导体异质结量子阱光辐射-热离子制冷的最优条件. 进一步分析了不同 Al 组分的 Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 材料以及不同的掺杂浓度对制冷效果的影响,为该领域的实验工作提供了极有价值的参考.

关键词:半导体异质结,光辐射,制冷

PACC: 7340L, 7890, 3280P

## 1. 引 言

1994 年, Mahan 提出通过在两个金属电极之间夹一个真空层的方法实现了通过热离子将热量从低温区运输到高温区的热离子制冷,从而掀起了研究热离子制冷的热潮<sup>[1]</sup>. 不久, Shakouri 和 Bowers 小组在此基础上提出以半导体异质结势垒代替金属间势函数差的半导体热离子制冷新方法,从而使热离子制冷方案更加可行<sup>[2]</sup>. 目前, 半导体热离子制冷已经成为国际上许多研究小组竞相研究的对象<sup>[3-5]</sup>. 传统的半导体热离子制冷的兴趣主要集中于通过热离子的输运将热量从低温区运输到高温区. 但是由于半导体材料具有较高的热导率, 在这一过程中, 仍然会有一定的热量从高温区通过热传导回到低温区, 从而影响制冷效率. 最近, Mal'shukov 和 Chao 提出了一种基于载流子复合发光的新型半导体热离子制冷方案, 即光辐射-热离子制冷<sup>[5]</sup>. 按照这一模型, 在 p 掺杂和 n 掺杂的宽带半导体之间放入一个未掺杂的窄带半导体, 形成一个 p-i-n 型的量子阱, 当外加正向偏压时, p 区和 n 区的空穴和电子将被注入到阱内, 在阱内部分电子和空穴将会发生发光复合产

生光子, 这些光子将会携带热量通过光辐射离开系统, 从而达到制冷的目的. 这一制冷方式通过将半导体热离子制冷与传统的发光制冷<sup>[6,7]</sup>相结合的方式巧妙地避免了由于热传导造成的热量由高温区向低温区的传导, 从而进一步提高了半导体热离子制冷的效率和可行性.

近年来, 随着半导体异质结制备技术的发展<sup>[8-10]</sup>, 精确地控制半导体异质结的生长已经成为可能. 这就为半导体量子阱热离子-光辐射制冷的实现创造了条件. 为了能够更好的对这方面的实验工作进行指导, 本文对半导体热离子-光辐射制冷系统的制冷效率进行了数值计算. 基于漂移-扩散模型和载流子的辐射和非辐射复合模型, 我们利用泊松方程、电流连续性方程自洽地计算出在考虑外加正向偏压条件下的半导体内部的载流子分布以及复合情况, 并进一步计算出光辐射-热离子制冷的制冷效率. 此外, 通过改变 Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 中铝的百分含量以及改变 p 区和 n 区的掺杂浓度, 来寻找最佳制冷条件. 通过计算可以发现当铝的含量为  $x = 0.35$ , 掺杂浓度为  $2.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时半导体光辐射-热离子制冷的效果最佳. 这一结果将对今后这方面的实验工作起到指导作用.

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号:10274100)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: kjjin@aphy.iphy.ac.cn

本文具体分析的光辐射-热离子制冷系统的结构如图 1 所示,在重掺杂的 GaAlAs 半导体中加入一层未掺杂的高纯 GaAs 半导体材料,形成一个 p-i-n 型的量子阱结构.为了防止杂质通过扩散作用进入高纯 GaAs 层内,还在 GaAs 与重掺杂的 GaAlAs 层之间加入一层未掺杂的 GaAlAs 作为垫层.

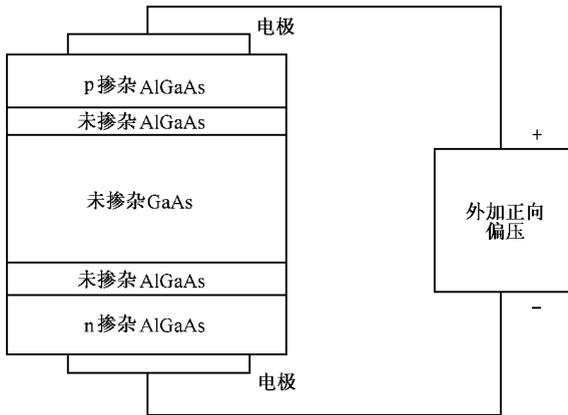


图 1 半导体光辐射-热离子制冷系统的结构示意图(掺杂区的厚度为 100 nm,未掺杂 Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 垫层的厚度为 50nm,阱的厚度为 100nm)

## 2. 物理模型

基于漂移-扩散模型,通过电流连续性方程和泊松方程联立进行自洽计算的方法来分析外加正向偏压条件下的半导体内部载流子分布情况<sup>[11,12]</sup>.一维泊松方程和电子电流及空穴电流连续性方程的联立表达式为

$$-\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = \frac{q}{\epsilon} (p(z) - n(z) + N_D - N_A), \quad (1)$$

$$D_n \frac{d^2n(z)}{dz^2} - \mu_n \frac{d\psi(z)}{dz} \frac{dn(z)}{dz} - \mu_n n(z) \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = R(z), \quad (2)$$

$$D_p \frac{d^2p(z)}{dz^2} + \mu_p \frac{d\psi(z)}{dz} \frac{dp(z)}{dz} + \mu_p p(z) \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = R(z), \quad (3)$$

其中,  $z$  代表半导体生长方向的坐标,  $\psi(z)$  代表电势,  $q$  代表电子电量,  $p(z)$  和  $n(z)$  分别代表空穴和电子的浓度,  $N_D$  和  $N_A$  则表示掺杂的施主杂质和受主杂质的浓度,  $D_p$  和  $D_n$  分别代表空穴和电子的扩散系数,  $\mu_p$  和  $\mu_n$  则分别代表空穴和电子的迁移率,  $\epsilon$  代表介电常数,  $R(z)$  代表复合率. 对于复合率

$R(z)$  在不同的区域内,根据不同的载流子复合方式,将分别考虑相应的复合率.

在重掺杂区域,由杂质产生的复合中心所导致的 Shockly-Read-Hall(SRH)复合是最主要的载流子复合方式,其复合率的表达式为<sup>[13]</sup>

$$R_{SRH}(z) = \frac{p(z)n(z) - n_i^2}{\tau_{n0}(p(z) + n_i) + \tau_{p0}(n(z) + n_i)}, \quad (4)$$

其中,  $n_i$  是 GaAlAs 的本征载流子浓度,约为  $1.04 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ ,  $\tau_{n0}$  和  $\tau_{p0}$  分别表示电子和空穴的寿命,在这里均取为  $1 \times 10^{-9} \text{ s}$ .

在势垒层区域,由于势垒层中仍然存在一定的杂质,其复合方式还是 SRH 复合,复合率的表达式同(4)式.

在阱区,由于阱的材料是未掺杂的高纯 GaAs,因此由于杂质所造成的载流子复合的情况可以不必考虑,阱内的主要复合方式是俄歇复合以及发光复合.对于俄歇复合,由于 GaAs 的价带上包括三个空穴的子能带,因而在俄歇复合的过程中由电子-空穴复合所产生的能量很容易传递给另一个空穴,使之跃迁到价带上的空穴子能级,这也就是所谓的空穴型俄歇复合<sup>[14]</sup>.其复合率为

$$R_{Aug}(z) = \gamma (p(z)^2 n(z) - p(z) n_i^2), \quad (5)$$

其中  $\gamma$  为俄歇因子,对于 GaAs 材料,  $\gamma = 6.5 \times 10^{-30} \text{ cm}^6/\text{s}$ .

发光复合的复合率可以表示为<sup>[15]</sup>

$$R_{rad} = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{q^2 P_{cv} \eta}{3\pi^2 m_0^2 \hbar^2 c^3} \right) \left( \frac{2\mu^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \times \exp\left( \frac{qV - \hbar\omega}{k_B T} \right) \hbar\omega \sqrt{\hbar\omega - E_g}, \quad (6)$$

其中  $P_{cv}$  是电子在导带和价带之间跃迁的动量矩阵,  $E_g$  为 GaAs 的禁带宽度,  $m_0$  为电子的质量,  $c$  是真空中光速,  $\mu^*$  是电子和空穴的折合质量,  $\hbar$  是普朗克常数,  $\omega$  是辐射的光子频率,  $\eta$  是反射系数,  $k_B$  为玻耳兹曼常数,  $T$  为温度.

通过前面所给出的公式可以自洽地计算出系统的价带和导带结构、半导体内的载流子分布以及复合的情况,计算中所采用的材料的参数见文献[16].图 2 给出了系统在外加正向偏压情况下的价带和导带的结构.根据计算所得的半导体内部载流子的分布和复合情况,我们进一步计算出在阱内的光辐射制冷效果,总的表达式为

$$Q = Q_{rad} - JV, \quad (7)$$

其中  $Q$  表示系统净吸收的热量,  $Q_{rad}$  表示由于发光

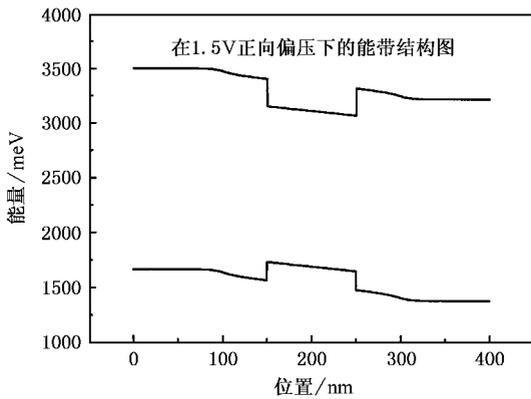


图2 经过自洽计算得到的在 1.5V 正向偏压下,系统的价带和导带的结构图

辐射所带走的热量,  $JV$  则代表由于外加电场所产生的焦耳热. 这里的焦耳热包括参与发光复合和俄歇复合的载流子所产生焦耳热. 为了简便考虑, 我们认为载流子在阱内完全复合. 这样, 上式就可以进一步写为

$$Q = 2 \int dz \int d\omega [\hbar\omega - qV] R_{\text{rad}}(\hbar\omega) - qV \int dz R_{\text{Aug}}(z). \quad (8)$$

经过积分计算, 最终的表达式可以记作

$$Q = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{8q^2 P_{\text{cv}}^2 \eta E_g}{3m_0^2 \hbar^2 c^3} \left( \frac{\mu^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \times \exp\left( \frac{qV - E_g}{k_B T} \right) \left[ \left( E_g + 3k_B T + \frac{15(k_B T)^2}{4E_g} \right) - qV \left( 1 + \frac{3k_B T}{2E_g} \right) \right] - qVR_{\text{Aug}}. \quad (9)$$

### 3. 结果与分析

对于不同组分  $x$ , 计算所得到的制冷效果见图 3. 由图 3 可以看出制冷效果随外加偏压的变化关系是最初随着外加偏压的增大, 制冷效果不断上升, 当达到最大的峰值点之后, 随着偏压的进一步增大制冷效果迅速下降以至于达到负值. 这表明, 采用光辐射-热离子制冷在一定的偏压下从理论上讲是可行的. 对制冷效果随偏压的变化关系可以这样理解: 从(6)式, 可以看出发光复合效率与外加电压的大小密切联系, 随着偏压的增大, 发光复合率以指数关系增加. 同时, 从(9)式可以看出, 随着偏压的增大, 参加发光复合的载流子所产生的焦耳热将会超过发光复合所吸收的热量. 这就解释了随着偏压的增大, 制冷

效果先上升, 当达到峰值后又会迅速下降.

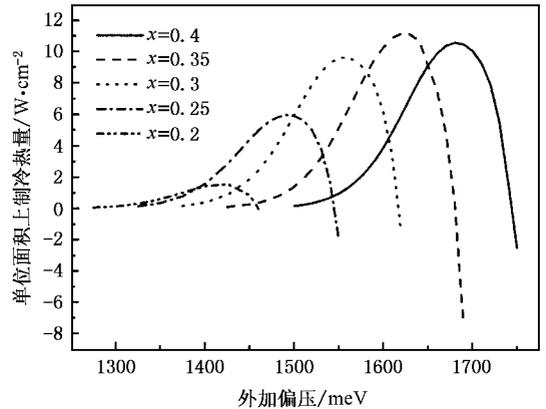


图3 制冷效果随 Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 中 Al 的组分  $x$  的改变(掺杂浓度为  $1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ )

比较不同的组分之后, 可以看出  $x = 0.35$  处吸收热量的峰值最高. 这一结果可以从以下两个方面理解. 一方面, 随着  $x$  的增大, 势垒与势阱的势能差也在不断的增大, 从而使得从阱外注入到阱内的载流子数量增大(在阱的边界处, 流入和流出的载流子实际上处于一个动态的平衡过程, 由于势垒与势阱能量差的增大, 阱内的载流子将不易流出, 从而使得注入阱内的净载流子数量增大), 导致阱内参与发光复合的载流子数量增加, 进而提高制冷效果. 另一方面, 随着  $x$  的增大, 载流子的迁移率将会不断下降, 这就阻碍了载流子向阱内的输运, 从而影响制冷效果. 这两方面的作用的结果导致了在  $x = 0.35$  处产生制冷的最高峰值.

进一步对  $x = 0.35$  的材料进行分析, 制冷效果随掺杂浓度的变化关系见图 4. 在图 4 中, 可以发现当掺杂浓度为  $2.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时的制冷效果最佳. 过大和过小的掺杂浓度都会影响制冷效果. 对这一结果也可以从以下两个方面来理解: 一方面, 从(5)式和(6)式可以看出, 与发光复合率相联系是电子从价带到导带的跃迁矩阵, 这一物理量是与载流子分布的均匀程度成正比的, 而俄歇复合率仅与载流子的浓度相关, 因此过高的掺杂浓度将会导致俄歇复合率的增长超过发光复合率的增长, 进而导致制冷效率的降低. 另一方面, 掺杂浓度过低, 既会造成注入阱内的载流子数量减少, 同时还会引起 p-n 结的内建电场的降低, 从而影响阱内的载流子的均匀分布, 导致制冷效果降低.

此外, 我们还分别计算了不同势垒厚度情况下

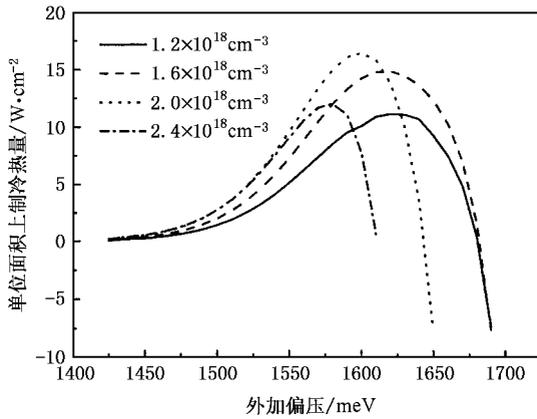


图4 制冷效果随掺杂浓度的改变( $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  中 Al 的组分  $x = 0.35$ )

的制冷效果. 根据计算结果, 在我们的模型中, 势垒厚度的变化对制冷效果的影响不大, 在实际的系统中可以忽略不同势垒厚度对制冷的影响.

## 4. 结 论

基于漂移-扩散模型和载流子的辐射和非辐射复合模型, 我们利用泊松方程、电流连续性方程自洽地计算出在外加正向偏压条件下的半导体量子阱结构的光辐射-热离子制冷的效率. 自洽计算结果表明, 在一定的外加偏压下, 光辐射-热离子制冷在理论上是可行的. 制冷效果的峰值随  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  材料中组分参数  $x$  以及半导体  $p$  区和  $n$  区的掺杂浓度的变化而改变. 计算结果表明在这样一个系统中, 当  $x = 0.35$ , 掺杂浓度为  $2.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时制冷效果最佳. 这一数值计算的结果对相应的实验工作的展开具有指导意义.

对 Koung-An Chao 教授和 A. G. Mal'shukov 教授所给予的有益讨论和课题研究的帮助表示由衷的感谢.

- [ 1 ] Mahan G D 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 4326
- [ 2 ] Shakouri A and Bowers J E 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 1234
- [ 3 ] Mahan G D and Woods L M 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4016
- [ 4 ] Mal'shukov A G, Zhongshui Ma, Antonyuk V B and Chao K A 2001 *Solid State Commun.* **119** 563
- [ 5 ] Mal'shukov A G and Chao K A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5570
- [ 6 ] Hou J D, Li Y M, Yang D H and Wang Y Q 1998 *Chin. Phys.* **7** 881
- [ 7 ] Yin J P, Gao W J, Liu C N and Wang Y Q 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 660 (in Chinese) [ 印建平、高伟建、刘南春、王义道 2001 物理学报 **50** 660 ]
- [ 8 ] Chen G B, Li Z F, Chai W Y, He L, Hu X N, Lu W and Shen X C 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1496 (in Chinese) [ 陈贵宾、李志锋、蔡炜颖、何力、胡晓宁、陆卫、沈学础 2003 物理学报 **52** 1496 ]
- [ 9 ] Chen G B, Lu W, Chai W Y, Li Z F, Chen X S, Hu X N, He L and Shen X C 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 911 (in Chinese) [ 陈贵宾、陆卫、蔡炜颖、李志锋、陈效双、胡晓宁、何力、沈学础 2004 物理学报 **53** 911 ]
- [ 10 ] He M, Lü H B, Zhou Y L, Cheng B L, Jin K J, Chen Z H and Yang G Z 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1370 (in Chinese) [ 何萌、吕惠宾、周岳亮、程波林、金奎娟、陈正豪、杨国桢 2005 物理学报 **54** 1370 ]
- [ 11 ] Horio K and Yanai H 1990 *IEEE Trans. Electron Devices* **37** 1093
- [ 12 ] Lundstrom M S, Schuelke R J 1983 *IEEE Trans. Electron Devices* **30** 1151
- [ 13 ] Neaman D A 2003 *Semiconductor Physics and Devices Basic Principles* (Third Edition) (McGraw-Hill Companies) p223
- [ 14 ] Abakumov V N, Perel V I and Yassievich I N 1991 *Nonradiative Recombination in Semiconductors* (Amsterdam, North-Holland, Amsterdam) p189
- [ 15 ] Ridley B K 1999 *Quantum Processes in Semiconductors* (Oxford, Clarendon Press) p432
- [ 16 ] Liu E K, Zhu B S and Luo J S 2003 *Semiconductor Physics* (Beijing: Publishing House of Electronics Industry) p443 (in Chinese) [ 刘恩科、朱秉升、罗晋生 2003 半导体物理学 (北京: 电子工业出版社) 第 443 页 ]

# Opto-thermionic refrigeration of semiconductor heterostructure<sup>\*</sup>

Han Peng<sup>1)</sup> Jin Kui-Juan<sup>1)†</sup> Zhou Yue-Liang<sup>1)</sup> Zhou Qing-Li<sup>1)</sup>

Wang Xu<sup>1)</sup> Zhao Song-Qing<sup>1)</sup> Ma Zhong-Shui<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>*Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China*

<sup>2)</sup>*Department of Physics, Peking University, Beijing 100871, China*

( Received 27 January 2005 ; revised manuscript received 28 February 2005 )

## Abstract

Numerical method has been used to analyze the opto-thermionic refrigeration process of semiconductor heterostructure. Based on the drift-diffusion model, current continuity equation and Poisson equation are employed to calculate the distribution of carriers, the radiative recombination rate and the Auger recombination rate of the semiconductor. In addition, we have calculated the effect of the changing of barrier height and the doping density on the refrigeration rate. Thus the optimum conditions of opto-thermionic refrigeration have been obtained based on these results. This work is of great significance for guiding the experiment research in the future.

**Keywords** : semiconductor heterostructure, optical radiation, refrigeration

**PACC** : 7340L, 7890, 3280P

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10274100 ).

<sup>†</sup> E-mail: kjjin@aphy.iphy.ac.cn