

# 量子阱光反射光谱的电调制机理

江德生 汤寅生 夏建白

(中国科学院半导体研究所, 北京)

**摘要**——研究了量子阱材料光反射光谱的电调制机理, 根据斯塔克效应, 对量子阱中非激子的带间跃迁和激子跃迁两种情况, 分析了电场引起的介电函数的改变和相应的光反射调制光谱线形, 对 GaAs/AlGaAs 量子阱所得光反射光谱的实验结果与理论分析基本符合。

**关键词**——量子阱, 调制光谱, 光反射。

## 1. 引言

光反射(PR)和电反射(ER)调制光谱既用来研究半导体的体材料, 也可以研究量子阱结构材料, 其中, 无接触的光反射谱更适用于研究量子阱结构材料。有足够证据表明, 在光反射调制光谱测量中, 泵浦光所引起的材料表面空间电荷区电场的变化以及这种电场变化对材料中电子状态的调制起着主要作用<sup>[1]</sup>, 也就是说, 光反射实质上也是一种电调制光谱。考虑到量子阱结构中电子波函数和能量状态的特殊性, 其电调制的机理与相应的体材料应有很大的不同。事实上, 量子阱材料的光反射光谱一般具有一阶微商线形, 而不是三阶微商线形<sup>[2]</sup>。

人们普遍认为, 在体材料情况下电调制的机理已相当清楚: 当以非激子的带间跃迁为主时, 电调制主要是Franz-keldysh效应引起的; 当以激子跃迁为主时, 则主要是由于激子的衰减和分解而产生电场调制。在量子阱材料中情况很不一样: 当电场方向与外延薄层垂直时, 由于载流子在此方向上的有效质量接近于无穷大, 不可能在电场方向上获得加速, 因此Franz-keldysh效应不可能起重要作用。另一方面, 由于势垒对准二维激子的约束效应, 量子阱中的激子在纵向电场作用下的衰减和分解比体材料要弱得多。Miller等指出<sup>[3]</sup>, 即使当电场比经典的激子离化电场大50倍时, 二维激子的吸收仍可分辨。因而, 量子阱材料中, 光反射的电调制机理是一个非常值得探讨的问题。我们认为, 对于量子阱中的激子跃迁和非激子跃迁来说, 子能带的斯塔克效应在调制机构中都起主要作用。特别对于零场下的允许跃迁, 反射谱的调制主要是由有效能隙(临界点能量)的电场调制决定。关于 GaAs/AlGaAs

多量子阱光反射光谱测量的实验结果与此理论预计相一致。

## 2. 子能级斯塔克移动和振子强度变化

关于电场对量子阱中电子和空穴的单粒子态以及激子态的影响已由若干作者进行过计算,过去的大量工作主要计算了量子阱中基态能级的行为,而较少涉及到光反射谱可测量的较高的子能级.采用无限深势阱模型对量子阱中的子能级和光跃迁几率进行微扰理论计算,可获得解折解,这种结果已被证明与用爱里函数进行数值求解的结果一致<sup>[4]</sup>,其优点是可直接用于分析电场对介电函数和反射率的影响.但是,子能级的斯塔克效应和振子强度的变化实际上与势垒高度密切相关,因此,用无限深势阱模型代替现实的有限深势阱计算的结果与实际情况相比将会有很大的误差<sup>[5]</sup>,定量的结果只能通过有限深势阱模型的数值计算才能获得.

首先,我们假定在多量子阱材料表面势垒区中的电场  $F$  是空间均匀的,此假定在耗尽层宽度与阱宽相比很大时成立.当量子阱结构由未故意掺杂材料构成时,此条件总能满足.在有效质量近似下,电子态波函数可取为

$$\psi_{cnk'}(x) = u_{c0}(x) \cdot e^{ik'x} \hat{\varphi}_{cn}(x), \quad (1)$$

式中  $u_{c0}(x)$  是  $k=0$  处导带的布洛赫因子,  $\hat{\varphi}_{cn}(x)$  是包络函数.如里改用无量纲单位,令距离  $\xi = x/d$ , 能量  $\varepsilon = E/E_0$ , 电场强度  $f = F/(E_0/d)$  (其中  $x$  为与薄膜垂直方向上的坐标,  $d$  为阱宽,  $E_0 = \hbar^2/2m_c^* \cdot d^2$ ,  $m_c^*$  为导带电子有效质量), 则可得包络函数  $\varphi_{cn}(\xi) = \hat{\varphi}_{cn}(x)$  的薛定格方程为

$$\left( \frac{d^2}{d\xi^2} - f\xi + \varepsilon_{cn} - \varepsilon_0(\xi) \right) \varphi_{cn}(\xi) = 0, \quad (2)$$

式中  $\varepsilon_0(\xi)$  表示在量子阱结构中导带边随位置  $\xi$  而变的依赖关系.与式(2)类似,在一定的近似下,对轻空穴和重空穴也可分别建立类似的薛定格方程

$$\left\{ \gamma_s \cdot \frac{d^2}{d\xi^2} + f\xi - \varepsilon_{vsn} + \varepsilon_{vs}(\xi) \right\} \varphi_{vsn}(\xi) = 0, \quad (3)$$

并解得价带包络函数  $\varphi_{vsn}$ . 上式中,下标  $s=l, h$  分别表示空穴的类型为轻空穴和重空穴,  $\gamma_s = m_c^*/m_s^*$ .

采用无限深势阱模型和二级微扰理论计算,可求出导带和价带子能级的移动  $\Delta\varepsilon_{cn}, \Delta\varepsilon_{vsn}$  及带间跃迁振子强度  $P_{nn's} = K \varphi_{cn'} | \varphi_{vsn} \rangle|^2$  (这里忽略了公共因子), 结果为

$$\Delta\varepsilon_{cn} = f^2 \left( \frac{2}{\pi} \right)^6 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{m^2 n^2}{(n^2 - m^2)^5}, \quad (4)$$

$$\Delta\varepsilon_{vsn} = -\frac{1}{\gamma_s} \cdot \Delta\varepsilon_{cn}, \quad (5)$$

$$P_{nn's} = N_c^{-1} \cdot N_{vs}^{-1} \begin{cases} 1 - f^2 \frac{2}{\pi^2 \gamma_s} \left( \frac{2}{\pi} \right)^6 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n^2 m^2}{(n^2 - m^2)^6}, & n = n' \\ f^2 \cdot \frac{1}{\pi^2} \left( \frac{2}{\pi} \right)^6 \left( 1 + \frac{1}{\gamma_s} \right) \frac{n^2 \cdot n'^2}{(n^2 - n'^2)^6}, & n \neq n' \end{cases} \quad (6)$$

$$\left. \begin{matrix} N_c \\ N_{vs} \end{matrix} \right\} = 1 + f^2 \cdot \frac{1}{\pi^2} \left( \frac{2}{\pi} \right)^6 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n^2 m^2}{(n^2 - m^2)^8} \left\{ \begin{matrix} 1, \\ \frac{1}{\gamma_s^2} \end{matrix} \right. \quad (7)$$

以上各式中,  $n$  是子能级的序号, 如  $n$  为偶数, 求和时  $m$  取奇数; 如  $n$  为奇数, 求和时  $m$  取偶数. 上述微扰计算给出的解折解表明, 量子阱中子能级能量随电场增大而发生移动, 其能量变化与电场  $F$  的平方成正比, 基态能级和各较高的子能级的能量移动方向相反. 此外, 随电场增大, 允许跃迁 ( $n=n'$ ) 的振子强度减小, 禁戒跃迁 ( $n \neq n'$ ) 的振子强度增大.

对于有限深势阱情况, 无法采用微扰理论计算. 如采用准稳态近似<sup>[6]</sup>, 将超晶格的有效质量理论推广到有电场的情况, 可定量地计算电场下多量子阱价带、导带子能级和光跃迁矩阵元随电场的变化. 在该计算中, 电场下超晶格的微扰势取为

$$V(x) = V_0(x) \pm eFx, \quad (8)$$

式中  $V_0(x)$  为零场下超晶格的微扰势, 由势垒材料产生,  $F$  为电场强度,  $\pm e$  分别代表空穴和电子电荷. 在计算中电场势被假定为一个周期函数, 在一个周期内取  $\pm eFx$  的形式, 以免在无限周期排列的超晶格中出现无穷大的电场势. 这虽然在实际上是不可能实现的, 但

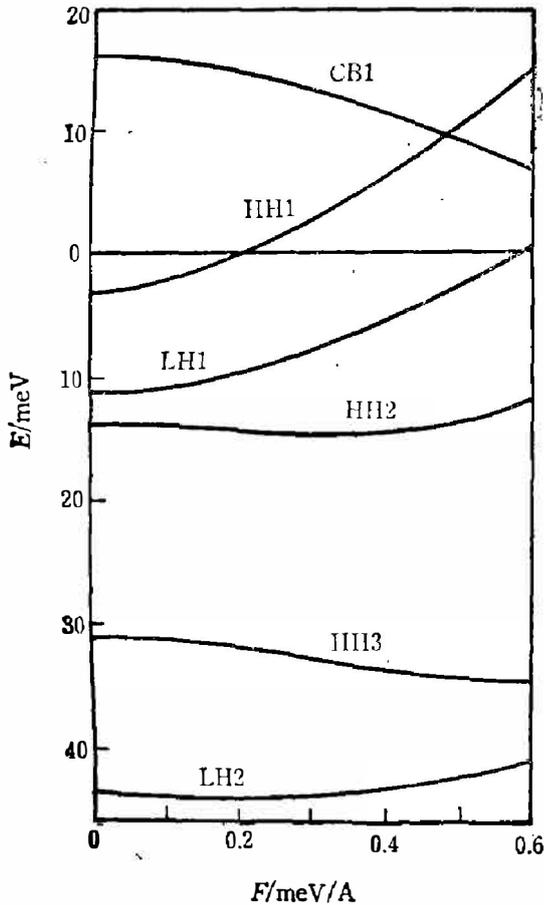


图 1 量子阱子能级能量随电场变化的依赖关系

(阱宽和垒宽各为 15.0nm,  $\Delta E_0=150\text{meV}$ ,  $\Delta E_1=100\text{meV}$ ,  $m_c^*=0.067$ , 价带参数为  $\gamma_1=6.85$ ,  $\gamma_2=2.1$ ,  $\gamma_3=2.9$ ,  $k=0$ )

Fig. 1 Electric field dependence of sublevel energies in a QW.

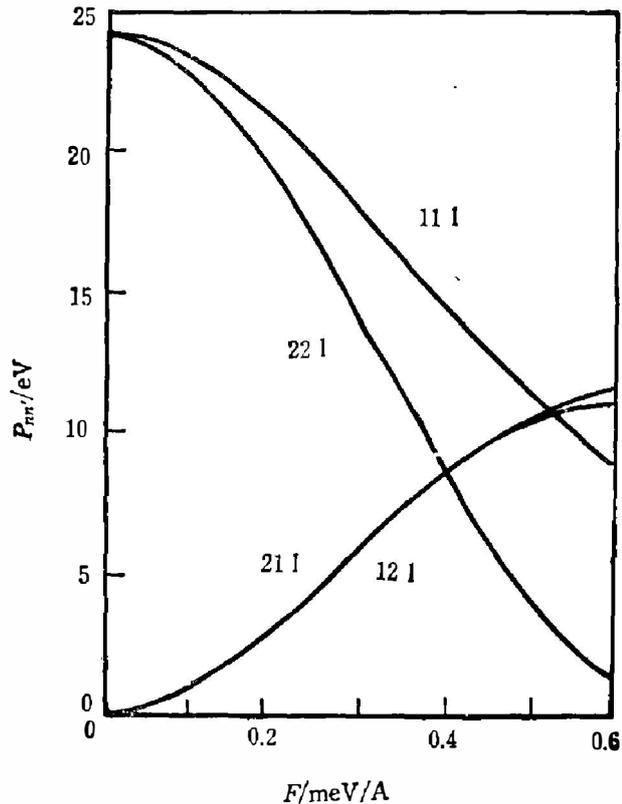


图 2 光学跃迁矩阵元平方的 Z 分量与电场的依赖关系 ( $k=0$ )

(计算中所用的参量与图 1 相同,  $nm'$  表示从第  $n$  个电子能级到  $m$  个价带轻空穴子能级的跃迁)

Fig. 2 Electric field dependence of Z-component of squared optical matrix element ( $k=0$ ).

只要势垒的宽度和高度足够大,粒子隧道穿透入势垒的几率非常小,则量子阱中的态可看成是稳定的。在这样的条件下,就有可能用计算超晶格的方法来计算单个量子阱在电场下的量子态和跃迁矩阵元,采用上述方法,对 GaAs/AlGaAs 多量子阱情况进行了数值计算,计算所得结果在许多方面定性地与无限深势阱模型一致,但定量差别很大。不仅斯塔克移动要增大很多,而且在一定的电场强度下,计算结果偏离微扰计算所预言的变化趋势,说明已不满足弱场条件了。计算表明,量子阱中最低子能带上的电子和空穴密度在电场方向发生偏移,有效质量越大,偏移越大。第二个子能带的电子态由于与第一个子能带电子态正交,因而密度向相反方向偏移。相应地,最低子能级随电场增大而降低,而第二个子能级随电场增大反而增高。它们在弱场下的能量位移与电场强度平方和有效质量成正比。图 1 示出了  $k_x=0$  时量子阱中的子能级随电场的变化。图 2 示出了光学矩阵元平方 ( $k_x=0$  处) 的  $n$  分量随电场的变化。由图 2 可以看出,当电场增大时,  $\Delta n=0$  的跃迁选择规则在中等大小的电场下逐步被  $\Delta n=\pm 1$  所代替。

对于量子阱中的激子态来说,由于激子束缚能随电场变化较小,可以证明在一级近似下,激子能隙随电场的变化主要是由于导带和价带子能级的斯塔克移动所引起的,其大小为两者的代数和。

### 3. 电场对介电函数和反射率的影响

我们分别考虑两种情况,即非激子的带间跃迁情况和激子跃迁为主的情况。

对于零场下的带间允许跃迁,可以证明,当满足  $\Gamma_{ns} \ll E_0$  ( $\Gamma_{ns}$  是展宽因子) 的条件时,电场引起的跃迁振子强度变化对介电函数影响很小,可以忽略不计。介电函数的变化主要是由电场作用下带间跃迁能量(临界点能量)变化所引起的(微扰理论计算给出,量子阱中能级能量随电场的变化  $\Delta E_{ns}$  与电场强度平方成正比),在电场作用下介电函数随电场的变化可写成<sup>[4]</sup>

$$\Delta \epsilon(E, F) \sim \sum_s \sum_n |p_s|^2 \cdot m_s^* \cdot \Delta E_{ns} \cdot \frac{1}{E - E_{ns} + i\Gamma_{ns}}, \quad (9)$$

式中  $m_s^*$  表示折合质量,  $s$  表示空穴的类型,  $\Gamma_{ns}$  是展宽因子,  $E_{ns}$  是有效能隙,  $|p_s|^2$  是振子强度。式(9)表明,  $\Delta \epsilon$  正比于零场介电函数的一阶微商。光反射光谱中  $\frac{\Delta R}{R}$  的线形应是  $\text{Re}(\Delta \epsilon)$  的线形和  $\text{Im}(\Delta \epsilon)$  的线形分别乘以权重塞拉芬系数  $\alpha$  和  $\beta$ <sup>[7]</sup> ( $\alpha - \beta = r \cdot e^{i\theta}$ ) 之后的叠加,即

$$\frac{\Delta R}{R} \sim \gamma_s \cdot \sum_s \sum_n |p_s|^2 \cdot m_s^* \cdot \Delta E_{ns} \cdot \text{Re} \left\{ \frac{e^{i\theta}}{E - E_{ns} + i\Gamma_{ns}} \right\}. \quad (10)$$

对于零场下的禁戒跃迁来说,其振子强度在电场作用下逐渐增大。当振子强度较小时,这一部份电场导致的跃迁对介电函数的贡献相当于在式(9)中对  $n$  求和中加上

$$\sum_{n'} \Delta E_{n'n} p_{n'ns} \frac{1}{E - E_{n'ns} + i\Gamma_{n'ns}}, \quad (11)$$

式中  $E_{n'ns}$  表示从价带第  $n$  个子能级到导带第  $n'$  个子能级之间的跃迁能量 ( $n \neq n'$ ),  $\Delta E_{n'ns}$  表示此能量的斯塔克移动。式(11)表明,禁戒跃迁引起的  $\Delta \epsilon(E, F)$  与允许跃迁部分的线形

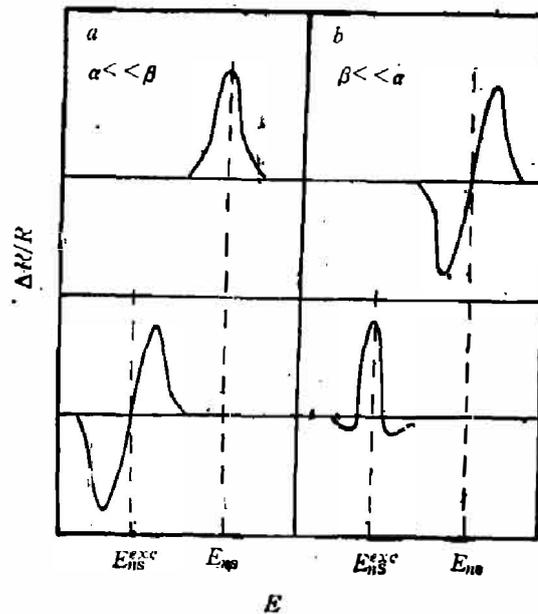


图3 非激子带间跃迁(上图)及激子跃迁(下图)的PR谱线形  
(塞拉芬系数为(a):  $\alpha \ll \beta$ ; (b):  $\alpha \gg \beta$ )

Fig. 3 PR lineshapes for band-band transitions (upper part)  
and for exciton transitions (lower part).

是一样的,因此,式(10)  $\frac{\Delta R}{R}$  如稍加改写也适用于禁戒跃迁部份.

对于  $n=n'$  的激子跃迁,电场引起的介电函数变化由下式表示:

$$\varphi \varepsilon^{exc}(E, F) \sim \sum_{n,s} |p_s|^2 \Delta E_{ns} \frac{1}{(E - E_{ns}^{exc} + i\Gamma_{ns}^{exc})^2}, \quad (12)$$

在推导式(12)时假定  $\Gamma_{ns}^{exc}$  与电场  $F$  无关.相应地在光反射谱中  $\frac{\Delta R}{R}$  的线形为

$$\left(\frac{\Delta R}{R}\right)^{exc} \sim \sum_{n,s} |p_s|^2 \Delta E_{ns} \operatorname{Re} \left\{ \frac{e^{i\theta}}{(E - E_{ns}^{exc} + i\Gamma_{ns}^{exc})^2} \right\}. \quad (13)$$

式(13)和式(10)中虽然  $\frac{\Delta R}{R}$  的数值因子比较接近,但两式所表示的光谱线形有相当大的差别.假定激子吸收区附近塞拉芬系数基本不变,则  $\left(\frac{\Delta R}{R}\right)^{exc}$  相当于式(10)  $\left(\frac{\Delta R}{R}\right)$  一次微商的反号,也就是说,如果在子能带之间的带间跃迁所观察到  $\frac{\Delta R}{R}$  是一个峰,则与之相应的激子结构  $\left(\frac{\Delta R}{R}\right)^{exc}$  就应该由一对正负峰组成,一个在低能侧(负峰),一个在侧(正峰),如图3(a)所示.反之,如果带间跃迁的  $\left(\frac{\Delta R}{R}\right)$  峰是正负峰结构,则相应的激子结构  $\left(\frac{\Delta R}{R}\right)^{exc}$  将主要是一个正峰,其低能侧和高能侧分别为两个较小的负结构,如图3(b)所示.

#### 4. 实验结果

为了验证上面所说的电调制机构,对 GaAs/AlGaAs 多量子阱样品进行了光反射调制光谱测量.实验装置与 shay 所采用的装置相似<sup>[1]</sup>.采用 1 mW 的 He-Ne 激光的 632.8 nm 谱线作为泵浦光源,并用 125 Hz 频率加以斩波,其功率密度约为 20 mW/cm<sup>2</sup>.测量中采用

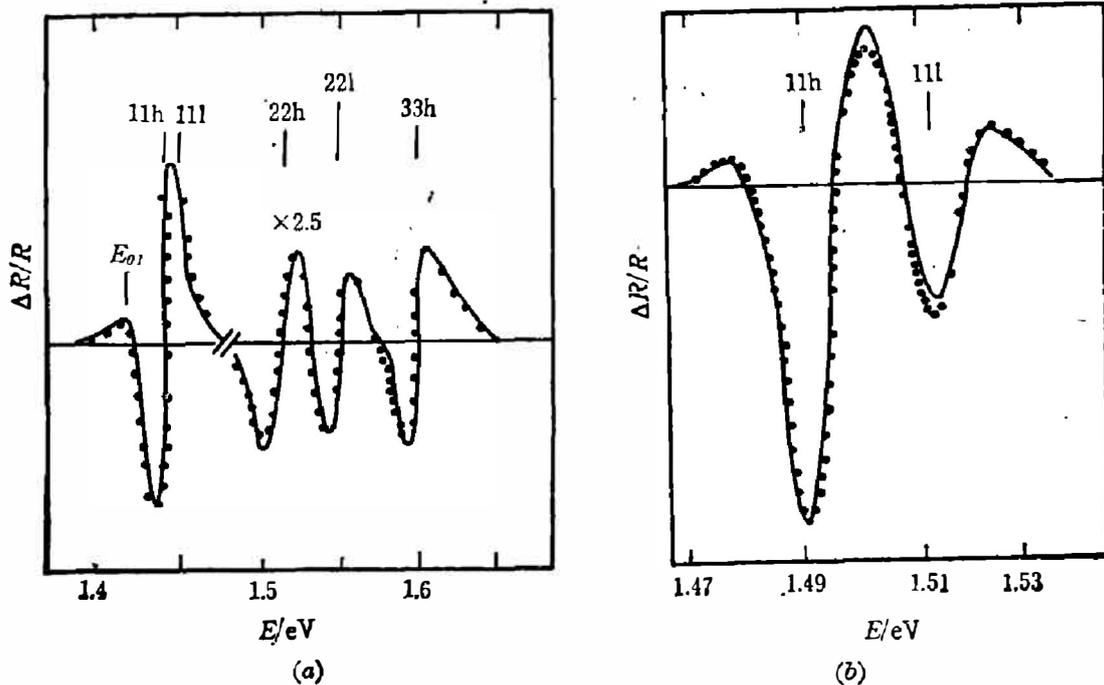


图 4 样品 A、B 的实温 PR 光谱

(a) 样品 A 带间跃迁为主; (b) 样品 B 激子跃迁为主

Fig. 4 PR spectra of samples A, B at room temperature

(a) band-to-band type (sample A) and (b) excitonic type (sample B).

硅 PIN 二极管作为探测器。

GaAs/Al<sub>z</sub>Ga<sub>1-z</sub>As 多量子阱结构样品是用分子束外延方法生长的。样品 A 阱宽为  $d=14.4\text{ nm}$ ,  $x=0.3$ ; 样品 B 阱宽  $d=10.45\text{ nm}$ ,  $x=1.0$ 。测量光谱分别示于图 4(a) 和图 4(b), 用实线表示, 点线是最小二乘法拟合曲线。

在体 GaAs 情况, 带边附近  $\alpha \gg \beta$ <sup>[7]</sup>, 估计在 GaAs/AlGaAs 材料中此关系式仍成立。因此我们预计图 4 的光谱线形应接近于图 3(b), 把图 3(b) 中两种线形与 A、B 两个实验光谱相比, 发现激子线形与样品 B 符合较好, 而非激子线形与样品 A 符合较好, 这一判断得到光致发光测量结果的支持。根据两个样品光致发光的温度依赖关系可以确定, 样品 A 在室温下的发光跃迁主要是非激子的带间跃迁发光, 而样品 B 即使在室温下仍以激子发光为主。在其它质量较好的 GaAs/AlGaAs 多量子阱样品中, 我们也注意到光反射谱结构在室温下仍以激子跃迁为主<sup>[8]</sup>。估计样品 A 和 B 的不同行为是由于材料质量特别是界面质量的差别引起的, 样品 B 的质量明显比样品 A 好。

假定样品 A 是带间跃迁为主而样品 B 是激子跃迁为主之后, 我们可分别用式(10)和式(13)对两个样品的  $\frac{\Delta R}{R}$  线形进行最小二乘法拟合。在图 4(a) 和 (b) 中, 拟合曲线用点线表示。拟合结果相当好。其中 11h 跃迁能量与室温光致发光测定的能量值基本一致。图 4(a) 中最低的能量用  $E_{01}$  表示, 被指认为是样品中 GaAs 缓冲层的直接能隙, 拟合时, 该峰线形取为 Franz-keldysh 三阶微商线形。

致谢——作者感谢民主德国洪堡大学物理系 R. Enderlein 教授的有益讨论。

## 参 考 文 献

- [1] Shay J. L., *Phys. Rev.*, **B2** (1970), 803.
- [2] Glembocki O. J. et al., *Appl. Phys. Letters.*, **46** (1985), 970.  
Glembocki O. J. and Shanabrook B. V., *Superlattices and Microstructures*, **3** (1987), 235.  
Tang Y. S. et al., *S. S. Commun.*, **63** (1987), 793.
- [3] Miller D. A. B. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984), 2173.
- [4] Enderlein R., Jiang D. S. and Tang Y. S., *Phys. Stat. Solidi.*, (b) **145** (1988), 167.
- [5] Bastard G. et al., *Phys. Rev.*, **B28** (1983), 3241.
- [6] 夏建白、黄昆, *物理学报*, **37** (1988), 1.
- [7] Seraphin B. O. and Bennett H. E., *Semiconductors and Semimetals*, Vol. 9, Ed. R. K. Willardson and A. C. Beer, Academic Press., New York, 1967, p. 499.
- [8] 汤寅生、江德生, *红外研究*, **7** (1988), 195.

## ELECTRO-MODULATION MECHANISMS OF OPTO-REFLECTANCE SPECTRA IN QUANTUM WELL STRUCTURES

JIANG DESHENG, TANG YINSHENG, XIA JIANBAI  
(*Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing, China.*)

### ABSTRACT

Electromodulation mechanisms of photoreflectance (PR) spectra of quantum well (QW) structures are studied. The variation of dielectric function due to electric field and the corresponding spectral line shapes of PR of QW<sub>s</sub> are analysed on the basis of the Stark effect modulation of non-excitonic and excitonic interband transitions. The experimental results for GaAs/AlGaAs QW agree well with the theoretical analysis.