

# InGaAs/GaAs 应变耦合量子阱光学性质的研究

徐 强 徐仲英 庄蔚华

(中国科学院半导体研究所, 北京)

**摘要**——用光荧光和光电流实验方法研究了 InGaAs/GaAs 应变耦合量子阱的光学性质。实验表明, 在耦合阱结构中, 势垒愈薄, 耦合愈强, 其对称态 $\leftrightarrow$ 对称态所对应的跃迁能量比未耦合阱中  $n=1$  重空穴激子跃迁能量降低更甚。实验中还观察到具有不同偏振特性的吸收峰, 并根据这一特征指认了轻、重空穴的跃迁。用双阱耦合模型计算了耦合阱结构中受限态之间的跃迁能量, 理论与实验符合较好。实验研究也表明, 在实验样品的 In 组分下, 轻空穴受限在 GaAs 阱层中。

**关键词**——量子阱, 光学性质, InGaAs/GaAs。

## 1. 引 言

近年来对半导体量子阱结构的研究已经从晶格匹配的材料系统扩展到晶格失配的材料系统。InAs-GaAs 应变材料系统在高速和光电器件应用方面具有较大的潜力而受到重视。关于 InGaAs/GaAs 应变量子阱和应变超晶格的研究已有较多的报道<sup>[1~4]</sup>, 但这类研究所涉及的简单方势阱结构难以为器件设计提供更多的灵活性。耦合量子阱结构是一种为人们感兴趣的新结构, 但是迄今为止, 关于这类结构的研究还仅限于 GaAs-AlGaAs 材料<sup>[5~7]</sup>。本文报道了对 InGaAs/GaAs 应变耦合量子阱结构的实验研究。通过考虑晶格失配所产生的双轴应变、量子尺寸等效效应, 并按照耦合阱的模型, 分析了低温光荧光谱和光电流谱, 讨论了量子态波函数的耦合对受限态能量的影响, 并根据光电流谱中吸收峰的偏振特性, 对实验中的轻重空穴跃迁作出了指认。

## 2. 样品和实验装置

实验样品是用分子束外延技术在 GaAs(001) 衬底上生长的, 具有 GaAs 缓冲层的多层

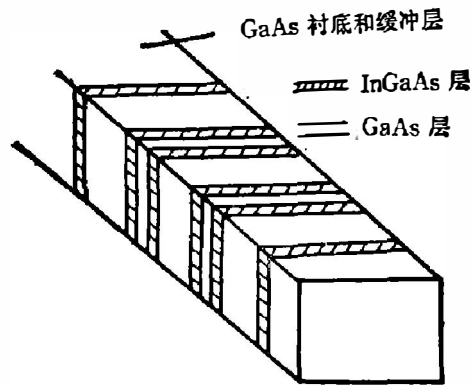


图 1 样品结构示意图

Fig. 1 The structure of the sample.

结构。GaAs 缓冲层厚度约为  $1\ \mu\text{m}$ ，InGaAs 层厚约为  $3\ \text{nm}$ ，共有 6 层。沿着生长方向，在 InGaAs 层之间的 GaAs 层厚度分别为  $50\ \text{nm}$ 、 $2.5\ \text{nm}$ 、 $50\ \text{nm}$ 、 $1.0\ \text{nm}$  和  $50\ \text{nm}$ ，GaAs 顶层厚度为  $50\ \text{nm}$ ，InGaAs 层中 In 的组分约为 0.16。样品结构见图 1。

在光荧光测量中，激发光源用 He-Ne 激光器 ( $\lambda = 632.8\ \text{nm}$ ) 和 SPEX-1403 双光栅单色仪，以及冷却的 SI 阴极光电倍增管。光电流实验用钨灯作光源，并用 WDG-30 型单色仪分光。样品的冷却和变温通过 1902 A 制冷系统完成。

### 3. 实验结果

通过变温和变激发强度，测量了样品的光荧光和光电流谱。在光荧光谱中观察到 3 个发光峰(参见图 2, 3)。在温度为  $11\ \text{K}$  时的变激发强度测量表明，3 个发光峰之间的相对强度没有明显的变化，但每个峰强度随着激发光强度的增加而线性地增加(参见图 2)。激发光强度不变时的变温测量表明，随着温度的提高，高能峰的发光强度逐渐降低，而低能峰的峰值强度增加。从图 2 中可以看到，3 个发光峰的半宽都较窄( $3\sim 4\ \text{meV}$ )，说明样品界面有较高的平整度。光荧光实验也表明，3 个发光峰是来自 3 个不同量子阱结构的激子复合发光。

在温度为  $11\ \text{K}$  和  $77\ \text{K}$  时，测量了样品在平行于界面方向的光电流谱，见图 4 和图 5。实验中观察到 5 个吸收结构，分别标记为 A、B、C、D、E。其中 A、B、C 3 个吸收峰在能量位置上与光荧光谱中的 3 个发光峰相对应，而 D 峰和肩峰 E 是光荧光实验中没有观察到的。为进一步了解这些谱结构所涉及的吸收机理，考察了光电流谱中这些结构的偏振特性。实验发现，当改变入射光的偏振方向时，E 峰没有明显变化，而其它的吸收峰偏振特性明显，并且 D 峰的表现与另外 3 个峰不一样。当入射光的偏振方向垂直于界面时，能量最高的 D 峰强度增加，而另外 3 个峰的强度相对减弱；当入射光的偏振方向平行于界面时，D 峰的强度减弱，而其它 3 个峰的强度相对增强。这些谱结构的偏振特性说明 D 峰的吸收机理与另外 3 个峰不同。在后面的讨论中将证明，D 峰的表现是轻空穴跃迁的特征，而 A、B、C 3 个峰的偏振特性是重空穴激子跃迁的特征。

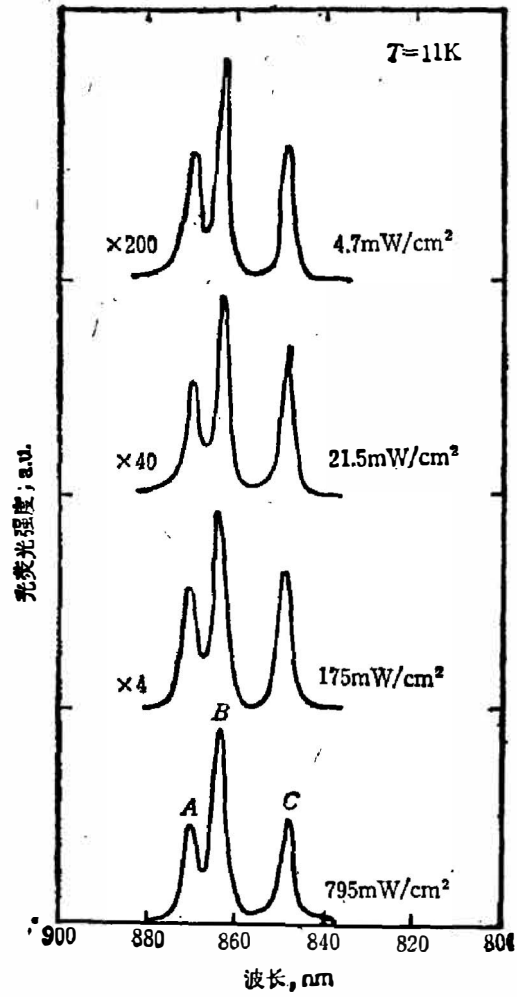


图2  $T=11\text{K}$  时样品光荧光谱与激发强度的关系  
 Fig. 2 Dependence of PL spectra at  $11\text{K}$  on excitation intensity.

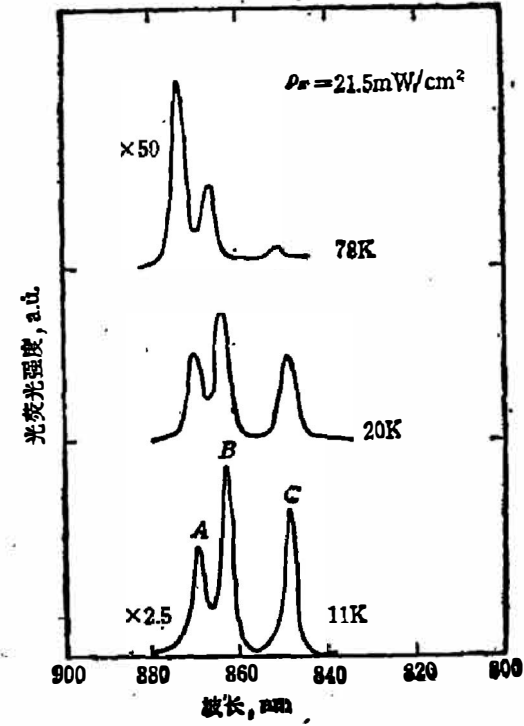


图3 样品光荧光谱随测量温度的变化  
 Fig. 3 PL spectra for various temperatures.

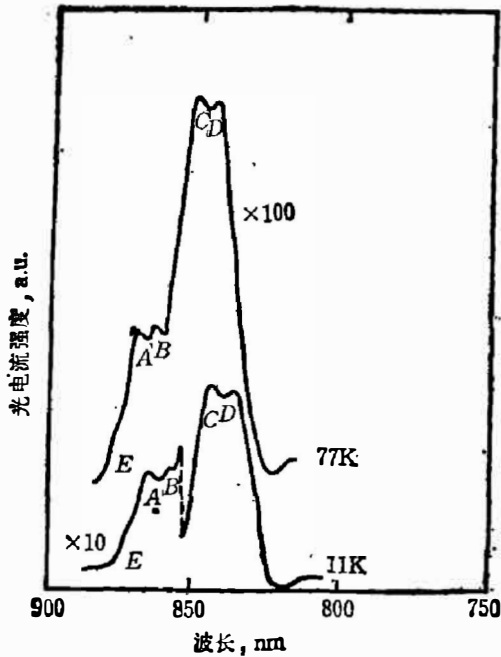


图 4  $T=11\text{K}$ 、 $77\text{K}$  时测得的样品光电流谱  
Fig. 4 Photocurrent spectra of the sample measured at  $11\text{K}$  and  $77\text{K}$ .

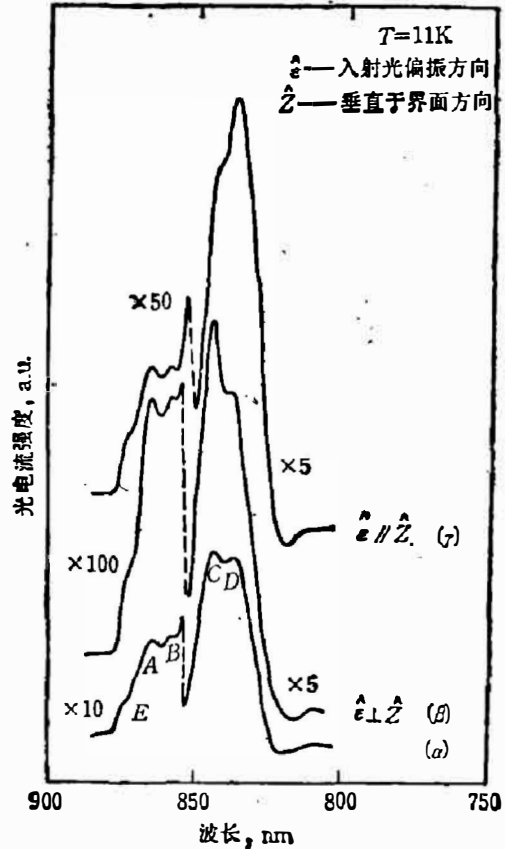


图 5 样品光电流谱的偏振特性  
( $s$  为样品生长方向,  $\epsilon$  为入射光的偏振方向)  
Fig. 5 Polarized photocurrent spectra of the sample.

### 4. 理论和关于实验现象的讨论

在 InGaAs-GaAs 应变材料系统中, InGaAs 材料的晶格常数在无应变时随 In 组分的增加而线性增大<sup>[8]</sup>, 当 In 的组分为 0.16 时, InGaAs 与 GaAs 材料之间的晶格失配可达 1.1%, 因此, 晶格常数的不匹配使该材料系统在平行于界面方向上产生了较大的双轴应变。InGaAs 层在平行于界面方向产生压缩应变, 而 GaAs 层产生张应变。根据 Matthews 和 Blakeslee<sup>[9]</sup> 的临界层厚度理论, 当应变层的厚度小于使材料产生晶格弛豫的临界层厚度  $L_c$  时, 应变层可以完全通过双轴应变适应晶格失配, 而不会在界面上发生晶格弛豫并出现缺陷。在 InGaAs-GaAs 材料系统中, 临界层厚度  $L_c$  与 In 的组分有关, 计算表明, 当 In 组分近似 0.16 时, 临界层厚度  $L_c \sim 20\text{nm}$ 。由于实验样品的 InGaAs 层厚度  $L$  远小于  $L_c$ , 又由于样品的 GaAs 层很厚, 并且在外延生长中用 GaAs 材料作缓冲层, 所以认为在平行于界面方向上各层材料有相同的晶格常数  $a_f$ , 而且  $a_f \approx a_{\text{GaAs}}$  ( $a_{\text{GaAs}}$  表示 GaAs 体材料的晶格常数)。

在平行界面方向上, InGaAs 层的应变可表示为

$$\epsilon \approx (a_f - a_{\text{InGaAs}}) / a_{\text{InGaAs}}, \tag{1}$$

式中  $a_{\text{InGaAs}}$  表示 InGaAs 体材料的晶格常数。由于假定在平行于界面方向上的样品晶格

常数等于 GaAs 体材料的晶格常数, 所以 GaAs 层的应变近似为零.

在双轴应变作用下, 应变层材料的能带结构发生了变化, 根据参考文献<sup>[10]</sup>, 在布里渊区中心处, 闪锌矿结构材料应变后的带隙可表示为

$$E_{g_h} = E_{g_0} + \left[ -2A \left( 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) + B \left( 1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}} \right) \right] \epsilon, \quad (2)$$

$$E_{g_l} = E_{g_0} + \left[ -2A \left( 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) - B \left( 1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}} \right) \right] \epsilon. \quad (3)$$

在式(2)和(3)中,  $H$  或  $L$  表示重空穴或轻空穴,  $C_{11}$  和  $C_{12}$  表示力常数,  $A$  和  $B$  分别代表流体静压形变势和切形变势,  $E_{g_0}$  代表 InGaAs 体材料的带隙. 从式(2)和(3)可以看到, 双轴应变可以分解为流体静压应变和单轴应变两个分量, 其中单轴应变分量使应变材料解除了未应变时在  $\Gamma$  点的简并而发生了分裂.

在单轴应变作用下, 重空穴带带隙减小, 因此 InGaAs/GaAs 量子阱结构中的重空穴受限在 InGaAs 阱层中. 轻空穴带隙增加, 而且 In 的组分越高, 应变越大, 带隙增加的也越多, 以至于 InGaAs 层的轻空穴带顶会高于 GaAs 价带顶, 结果 GaAs 层成为轻空穴势阱, 即形成所谓第 II 类超晶格<sup>[11]</sup>. 式(2)和式(3)的计算结果表明, 在实验样品的组分下, 轻、重空穴带隙之差约为 70 meV, 选择界面上重空穴带隙突变比  $\Delta E_c : \Delta E_v = 80 : 20 \sim 60 : 40$ , 都可以得到轻空穴限制在 GaAs 层中的结果. 后面的讨论将说明这一结果与实验观察一致.

图 6 表示样品沿生长方向上样品带隙的变化, 从图 6 可以看到, 对重空穴带, 沿着生长方向构成两对耦合的双阱和两个单阱, 它们具有相同的阱宽和势垒高度. 为了计算耦合阱结构中的受限量子态, 作出以下几种基本近似: (1) 使用 Bastard<sup>[12]</sup> 的包络函数近似; (2) 将耦合的双阱作为整体考虑; (3) 将 InGaAs-GaAs 界面的带隙突变比取为  $\Delta E_c : \Delta E_v = 70 : 30$ <sup>[13]</sup>; (4) 由于应变对垂直于界面方向的有效质量影响不大<sup>[14]</sup> 而不予考虑; (5) 忽略价带的混合和有效质量的非抛物带性质, 由于在使用计算结果时仅考虑最低受限态的能级, 所以假设(5)是合理的.

根据上面的近似, 可以得到耦合阱中受限态的本征值方程为

$$\left[ \frac{\beta^2}{m_1^2} (e^{\beta a/2} \mp e^{-\beta a/2}) - \frac{\alpha^2}{m_2^2} (e^{\beta a/2} \pm e^{-\beta a/2}) \right] \sin \alpha L = \frac{2\alpha\beta}{m_1 m_2} e^{\beta a/2} \cos \alpha L, \quad (4)$$

$$\alpha = \left[ \frac{2m_2 E}{\hbar^2} \right]^{1/2}, \quad (5)$$

$$\beta = \left[ \frac{2m_1 (V - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2}. \quad (6)$$

在式(5)~(7)中,  $a$  代表耦合阱中的势垒宽度,  $L$  代表势阱宽度,  $m_1$  和  $m_2$  分别表示 GaAs 和 InGaAs 层中粒子的有效质量,  $V$  表示势垒高度,  $E$  表示受限态的能级. 式(4)中上面

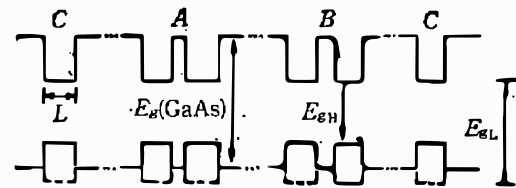


图 6 样品在生长方向上的能带组态  
(A、B 表示耦合阱, C 表示单阱,  $E_{g_h}$  和  $E_{g_l}$  分别代表应变分裂的 InGaAs 重空穴和轻空穴带隙)

Fig. 6 Possible energy band configuration along the growth direction in InGaAs/GaAs strained quantum well

( $E_{g_h}$ —heavy hole band gap,  $E_{g_l}$ —light hole band gap, A and B—coupled quantum well, C—single quantum well).

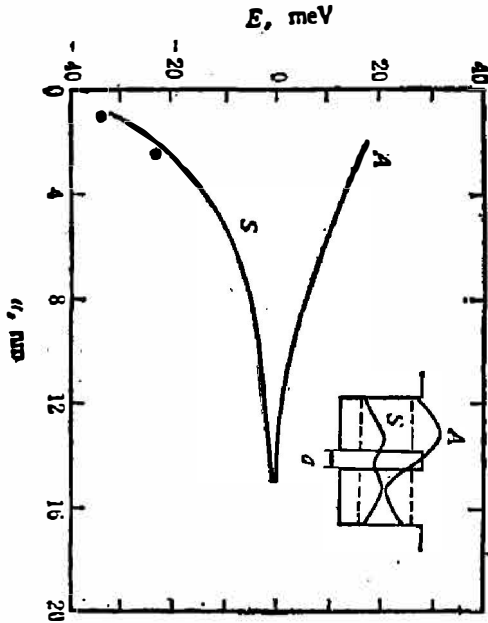


图7 耦合阱中的对称↔对称态跃迁(S)和反对称态↔反对称态跃迁(A)的能量与势垒厚度的关系

(能量零点以单量子阱中的  $n=1$  重空穴激子的能量算起, ● 为实验测量数据)

Fig. 7 Calculated transition energy vs separation between subwells in the coupled quantum well

(A and S refer to the antisymmetric and symmetric characters, respectively).

在量子阱中, 激子的吸收系数正比于振子强度<sup>[17]</sup>, 即

$$\alpha_{nm} \propto f_{nm} = \frac{1}{m_0 \hbar \omega} \left| \sum_{k_j} G_{nm}(k_j) \hat{\epsilon} \cdot \hat{p}_{nm}(k_j) \right|^2 \quad (7)$$

式(7)中  $n, m$  分别代表电子和空穴的量子数,  $m_0$  表示自由电子的质量,  $\hbar\omega$  表示入射光的能量,  $G_{nm}(k_j)$  表示激子包络函数的傅里叶分量,  $\hat{\epsilon}$  表示入射光的偏振方向,  $\hat{p}_{nm}(k_j)$  是光跃迁矩阵元, 并有

$$\hat{p}_{nm}(k_j) = \langle \psi_m^h(k_j) | \hat{p} | \psi_n^e(k_j) \rangle \quad (8)$$

表1 计算中使用的参数

Table 1 The material parameters used in the calculation.

材 料	●aAs	InAs
$a(\text{nm})$	0.56532	0.60584
$A(\text{eV})$	-9.8	-5.8
$B(\text{eV})$	-1.76	-1.8
$C_{11}(10^{11} \text{dyn/cm}^2)$	11.88	8.33
$C_{12}(10^{11} \text{dyn/cm}^2)$	5.32	4.53
$m_e^*/m_0$	0.0665	0.023
$m_h^*/m_0$	0.45	0.41
$m_l^*/m_0$	0.904	0.032

的正、负符号表示对称波函数组态的本征值方程, 而下面的正、负符号表示反对称波函数组态的本征值方程。

采用参考文献<sup>[15]</sup>给出的 InGaAs 体材料的带隙公式, 并通过表 1 所给出的 InAs、GaAs 参数线性内插得到计算所需要的 InGaAs 参数<sup>[16]</sup>, 根据式(1)~(2), 计算在阱宽一定时, 耦合阱中受限量子态带隙随势垒厚度  $a$  的变化, 计算结果由图 7 给出。从图 7 可以看到, 耦合阱中的势垒越薄, 受限态的耦合也越强, 对称波函数组态所对应的带隙减小, 而反对称波函数组态所对应的带隙增大。图 7 中的插图表示了对称性和反对称性波函数的组态。

根据上面的考虑, 光荧光谱中的高能峰对应于样品中单阱  $n=1$  重空穴激子的复合发光, 而两个低能峰按能量由高至低分别代表势垒宽度分别为 2.5 nm 和 1.0 nm 的耦合阱中对称态↔对称态的  $n=1$  重空穴激子的复合发光。图 7 按这一考虑标出了光荧光实验数据, 计算值与实验值基本一致, 说明上面的理论考虑是合理的。

在式(8)中,  $\psi_m^h(k_f)$  和  $\psi_m^e(k_f)$  分别表示空穴和电子的波函数,  $\hat{p}$  代表动量算符. 在式(7)中, 由于

$$\hat{\epsilon} \cdot \hat{p}_{nm}(k_f) = \epsilon_x p_{nm_x}(k_f) + \epsilon_y p_{nm_y}(k_f) + \epsilon_z p_{nm_z}(k_f), \quad (9)$$

所以当入射光的偏振方向改变时, 激子的吸收系数将随之改变. 根据参考文献[18], “纯”的重空穴态相应的跃迁矩阵元仅包括  $p_{nm_x}$  和  $p_{nm_y}$  两个分量, 而轻空穴态同时包括  $\hat{p}_{nm}$  的 3 个分量, 因此, 对于垂直界面方向偏振的入射光 ( $\hat{\epsilon} = \epsilon_z$ ), 重空穴激子的吸收是禁戒的, 而轻空穴激子的吸收是允许的; 当入射光的偏振方向平行于界面方向时 ( $\hat{\epsilon} = \epsilon_x$  或  $\epsilon_y$ ), 轻重空穴激子的吸收都是允许的. 值得强调的是, 在离开  $k_f = 0$  点, 由于轻、重空穴态的混合, 当  $\hat{\epsilon} = \epsilon_z$  时, 重空穴激子的吸收并不是完全禁戒的<sup>[19]</sup>, 在实验中, 由于光的散射和实验使用的偏振片的偏振度不很高, 也会产生重空穴激子吸收.

根据上面的定性讨论, 可以认为, 当入射光的偏振方向垂直于界面时, 轻空穴激子的吸收相对增强, 而重空穴激子的吸收相对减弱; 当入射光的偏振方向平行于界面时, 轻空穴激子的吸收相对减弱, 而重空穴激子的吸收相对增强. 因此, 在光电流谱中, 根据 A、B、C、D 4 个吸收峰的偏振特性, 说明 D 峰属于轻空穴激子的吸收, 而 A、B、C 3 个峰是样品中 3 个不同势阱结构的重空穴激子吸收产生的.

表 2 列出 77K 时光荧光和光电流实验中各个峰的跃迁能量及计算的能量值, 从表 2 中可以看出, D 峰与 A、B、C 3 个峰之间的能量间隙分别为 54、43 和 17 meV. 而根据轻空穴受限在 GaAs 层中的考虑而计算的能量值与实验值基本一致. 因此, 在实验样品的 In 组分下, 认为轻空穴限制在 GaAs 层中的结论是合理的.

比较 11K 和 77K 测得的光电流谱, 未发现光电流谱中标记为 E 的肩峰在温度增高时相对变弱, 由此可排除它与阱中杂质的吸收有关, 但要确认其跃迁机理还要做进一步研究.

表 2 实验数据与计算值的比较 ( $T = 77\text{K}$ )

Table 2 Comparison between the experimental data and the calculated values

跃迁峰	光荧光 实验值 (eV)	光电流 实验值 (eV)	理论值 (eV)
A	1.421	1.425	1.422
B	1.431	1.436	1.433
C	1.454	1.462	1.456
D	—	1.479	1.481
E	—	1.412	—

## 5. 结 论

通过光荧光和光电流实验, 研究了 InGaAs/GaAs 应变耦合量子阱的光学性质. 实验中观察到的跃迁峰表明, 由于阱中量子态的耦合, 使得耦合阱中对称波函数组态对应的  $n=1$  重空穴激子跃迁能量与单阱  $n=1$  重空穴激子的跃迁能量比较, 向低能方向移动了, 耦合越强, 向低能的移动也越大. 在光电流实验中发现了在光荧光实验中未观察到的跃迁峰, 通过偏振实验和分析, 指认了其中的 D 峰是由于轻空穴激子的吸收产生的. 用双阱耦合的模型计算了这些跃迁峰的能量, 理论与实验符合得较好, 计算结果还表明轻空穴应该受限在 GaAs 阱层中.

## 参 考 文 献

- [1] Frity I. J. et al., *GaAs and Related Compounds*, No. 65, P. 241, 1982.
- [2] Roth A. P. et al., *Superlattices and Microstructures*, **2** (1986), 507.
- [3] Devine R. L. S. et al., *Solid State Communications*, **65**(1988), 19.
- [4] Anderson N. G. et al., *J. Electron. Mater.*, **14**(1985), 187.
- [5] Dingle R., *Festkörperprobleme*, XV, P. 21, 1985.
- [6] Yariv A. et al., *J. Appl. Phys.*, **58** (1985), 8669.
- [7] Torabi A. et al., *SPIE*, **792** (1987), 152.
- [8] Landolt Börnstein, *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, New Series Ed. O. Madelung, Beilin, Vol. 17, 1982.
- [9] Matthews J. W. et al. *J. Cryst. Growth*, **27**(1974), 118.
- [10] Asai H. et al., *J. Appl. Phys.*, **54**(1983), 2052.
- [11] Esaki L., *J. Quantum. Electron.*, **QE-22** (1986), 1611.
- [12] Bastard G. et al. *J. Quantum. Electron.*, **QE-22**(1986), 1625.
- [13] Ji G. et al. *J. Vac. Sci. Technol.*, **B5**(1987), 1346.
- [14] Bir G. L. and Pikus G. E., *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*, 1974.
- [15] Leu Y. T. et al., *J. Electron. Mater.*, **8**(1979), 663.
- [16] 同参考文献[8].
- [17] Yu P. W. et al., *Phys. Rev.*, **B35**(17)(1987), 9250.
- [18] Hong S. et al., *Superlattices and Microstructures*, **3**(6), 645 (1987).
- [19] 同参考文献[18].

## INVESTIGATION OF OPTICAL PROPERTIES OF STRAINED-LAYER COUPLED QUANTUM WELLS IN InGaAs/GaAs

XU QIANG, XU ZHONGYIN, ZHUANG WEIHUA  
(Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing, China)

### ABSTRACT

The optical properties of the strained-layer coupled quantum wells in InGaAs/GaAs have been investigated by the photoluminescence and photocurrent spectrum techniques. The excitonic transitions of both heavy and light holes are observed in the spectra and assigned by their polarization features. The experimental results show that the energies of heavy hole excitons corresponding to transitions of symmetry to symmetry states shift to lower energies, as the barrier becomes thinner in the coupled wells. The excitonic transition energies calculated with a model of coupled two wells, which takes into account both strain and quantization, are in good agreement with the measured values. This work also suggests that light holes are confined in GaAs layer at the In composition of the sample.