

# 关于多量子阱光谱的部分相干模型计算\*

马朝晖 陆 卫 刘兴权 茅惠兵 邱岳明 沈学础

(中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家重点实验室, 上海, 200083)

**摘要** 详细探讨了多层膜反射光谱的理论计算, 考虑了在实际光谱测量中光源有限相干长度对膜层和衬底结构样品的影响, 提出了一种简易实用计算方法, 并在相应的实验光谱计算中显示出这种方法的优越性.

**关键词** 多层薄膜, 光谱, 相干长度.

## 引言

膜层厚度降至纳米量级的量子阱与超晶格材料, 为在各种光电领域的工业化应用提供了物理保证<sup>[1,2]</sup>. 人们可以用光谱方法从光束的干涉特性获得薄层光学厚度的信息, 而从光谱的一些特征结构获得与薄层材料相关的基本物理参数. 然而无论是光谱的干涉还是薄膜材料所固有的本征光谱结构, 在光谱中是一并反应出来的, 而且还相互耦合而造成光谱结构的非线性迭加. 这样, 若要从这种简单的光谱方法中较全面地获得膜层的各种物理参数, 需要一定的理论分析与模拟计算. 这种基本理论模型已有很多研究, 但对于多层结构, 这些理论都是基于光束的相干长度为无穷大的基本假定. 而大多数商品化光谱仪均使用普通光源, 这些光的相干长度均不超过毫米量级, 因此光束在待测样品中传输光程大于毫米量级时干涉效应消失, 但材料对应的本征光谱结构不受影响. 至今尚未见到考虑光源相干长度所导致的在光谱中既有相干光束又有非相干光束情况的简易计算方法.

本文在较全面讨论对这类问题的多种处理方法之后, 给出一种有效的近似计算方法, 并将此方法应用于实验光谱.

## 1 薄膜材料中光传播分析与部分相干模型

我们选用了用 Riber32R&D 分子束外延设备生长的高品质的 GaAs/AlGaAs 多量子阱结构作为分析样品. 这种材料的结构如图 1 所示. 当光束正入射到外延膜上, 在外延膜中各个界面及外延膜与衬底界面形成的多束光相互间是相干的, 而含有衬底与真空界面反射项的所有光束之间和它们与其它光束之间, 因光程差均已超出光源相干长度而不相干. 因此, 对于这类样品的光谱, 必须考虑到部分相干问题.

\* 国家自然科学基金资助项目

本文 1993 年 11 月 25 日收到, 修改稿 1994 年 7 月 6 日收到

图 2 示出几种计算结果及实测结果, 计算和测量时采用薄膜和衬底参数完全相同的样品. 图 2 表明本文将要讨论的部分相干模型的计算结果与实测结果相符得最好, 而完全相干近似给出的光谱, 由于衬底的影响导致光谱非常致密, 明显与实验结果不符. 采用衬底无限法在计算反射谱 (如虚线所示) 时虽然避免了由衬底引入的致密干涉条纹, 但由于未计入衬底与真空界面的反射贡献, 在材料较透明区域计算的反射率与实验有较大出入.

在我们的部分相干模型中, 原理图 3(a) 中的第  $m$  层为衬底层, 并近似地认为经过衬底层后形成的多光束是完全不相干的, 而由外延层 ( $m-1$  层) 形成的多光束是完全相干的. 这样可

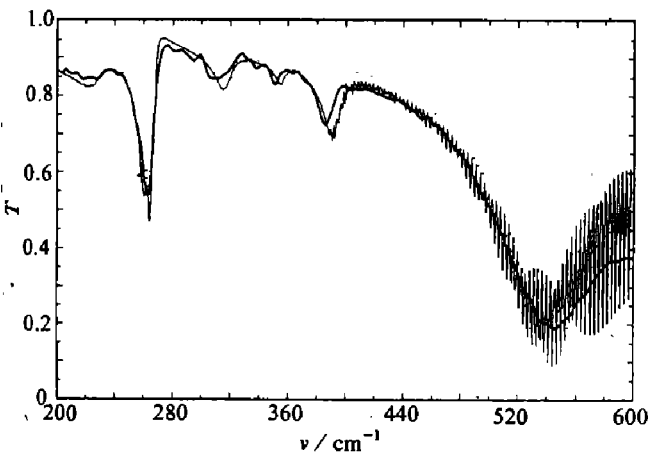


图 2 GaAs/AlGaAs 样品反射谱曲线 (粗实线: 实验曲线; 细实线: 完全相干模型计算曲线; 虚线: 部分相干模型计算曲线; 点线: 衬底无限模型计算曲线)

Fig. 2 Reflection spectra of the GaAs/AlGaAs sample (thick solid line: experimental; thin solid line: calculated for complete interference; dashed line: calculated for partial interference; dotted line: calculated for infinite substrate)

$$\left. \begin{aligned} \tilde{b}_i &= \tilde{a}_i \tilde{t}_{i-1,i} \tilde{b}_{i-1} + \tilde{a}_i \tilde{r}_{i,i-1} \tilde{c}_i, & (i=1, \dots, m-1) \\ \tilde{c}_i &= \tilde{a}_i \tilde{t}_{i+1,i} \tilde{c}_{i-1} + \tilde{a}_i \tilde{r}_{i,i+1} \tilde{b}_i, & (i=1, \dots, m-1) \\ \tilde{b}_m &= \tilde{r}_{m,m-1} \tilde{c}_m + \tilde{t}_{m-1,m} \tilde{b}_{m-1}, \\ \tilde{c}_0 &= \tilde{c}_{0,1} \tilde{b}_0 + \tilde{t}_{1,0} \tilde{c}_1. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

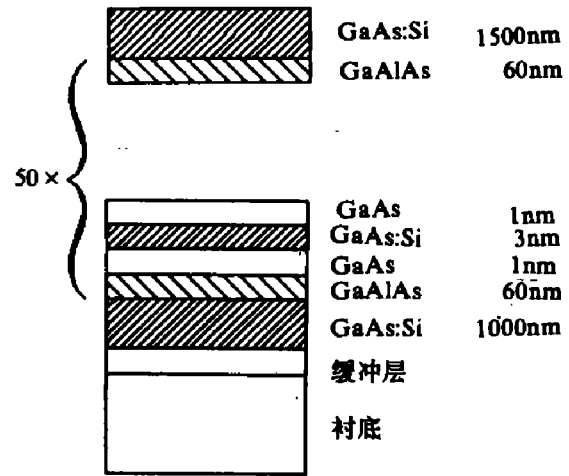


图 1 GaAs/AlGaAs 样品结构  
Fig. 1 Structure of the GaAs/AlGaAs sample

以将这一模型分为两部分: 一部分是外延层中完全相干部分, 另一部分是衬底中完全不相干部分. 具体数学框架如下: 在正入射情况下, 有

$$\left. \begin{aligned} \tilde{r}_{i,j} &= (\tilde{n}_j - \tilde{n}_i) / (\tilde{n}_j + \tilde{n}_i), \\ \tilde{t}_{i,j} &= 2\tilde{n}_i / (\tilde{n}_j + \tilde{n}_i), \\ \tilde{a}_i &= e^{I\tilde{n}_i d_i / \lambda}. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

其中  $\tilde{n}_i$  是第  $i$  层介质的复折射率,  $\tilde{r}_{i,j}$  是第  $i$  层介质到第  $j$  层介质的振幅反射率,  $\tilde{t}_{i,j}$  是第  $i$  层介质到第  $j$  层介质的振幅透射率,  $\tilde{a}_i$  是单位振幅的光经过厚  $d_i$  的介质  $\tilde{n}_i$  的传播后的振幅.

如图 3(a) 所示, 由于在薄膜中光是相干的, 光振幅可以矢量相加. 我们可以用  $\tilde{b}_i$  来等效所有向下的光线的振幅,  $|\tilde{b}_i|$  表示振幅强度,  $\arg \tilde{b}_i$  表示此时相对于初始点的相位差; 用  $\tilde{c}_i$  等效所有向上的光线的振幅.  $\tilde{b}_i, \tilde{c}_i$  满足式 (1), 得到

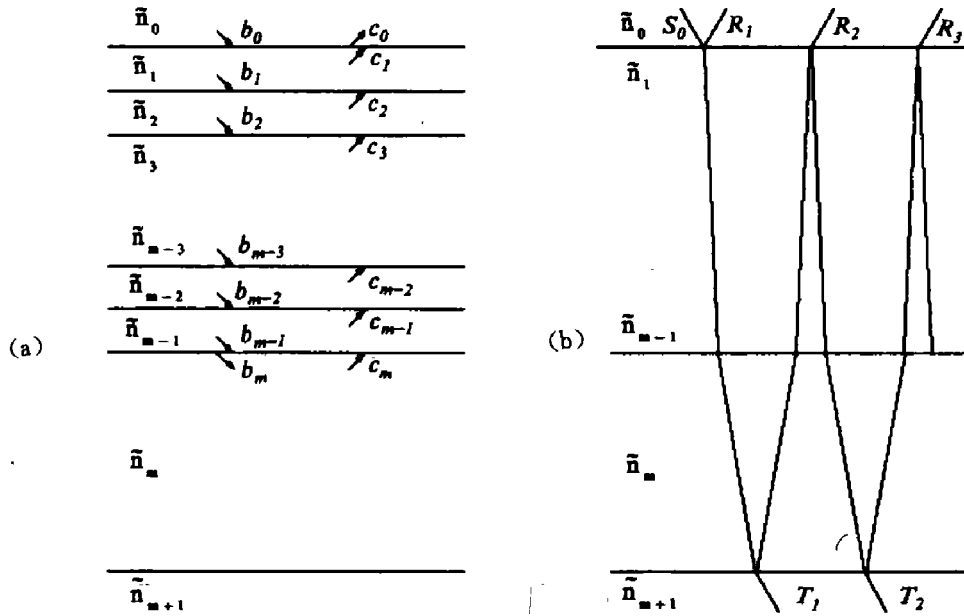


图 3 (a) 光在多层膜中传播; (b) 光在多层膜和衬底中传播  
 Fig. 3 (a) transmission of light in multi-layer film;  
 (b) transmission of light in multi-layer film and substrate

解  $2m$  元一次线性代数方程式 (2), 得到

$$\left. \begin{aligned} \tilde{c}_0 &= \tilde{c}_{0+} \tilde{b}_0 + \tilde{t}_{0-} \tilde{c}_m, \\ \tilde{b}_m &= \tilde{t}_{m+} \tilde{b}_0 + \tilde{r}_{m-} \tilde{c}_m. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

其中  $\tilde{r}_{0+}$ 、 $\tilde{t}_{0-}$ 、 $\tilde{t}_{m+}$ 、 $\tilde{r}_{m-}$  是关于  $\tilde{a}_i$ 、 $\tilde{t}_{i,i-1}$ 、 $\tilde{t}_{i-1,i}$ 、 $\tilde{r}_{i,i-1}$ 、 $\tilde{r}_{i-1,i}$  ( $i=1, \dots, m$ ) 的常数.

由于第  $m$  层存在光线不相干情况, 所以, 如图 3(b) 所示, 对于不相干情况我们可以用能流密度  $S$  来计算<sup>[3]</sup>. 计算得到总透射率  $t$  和总反率  $r$  为

$$\left. \begin{aligned} t &= \frac{T}{S_0} = \frac{(n_{m+1}/n_0) |\tilde{t}_{m+} \tilde{a}_m \tilde{t}_{m,m+1}|^2}{1 - |\tilde{a}_m^2 \tilde{r}_{m,m+1} \tilde{r}_{m-}|^2}, \\ r &= \frac{R}{S_0} = \frac{|\tilde{r}_{0+}|^2 + |\tilde{t}_{m+} \tilde{a}_m^2 \tilde{r}_{m,m+1} \tilde{t}_{0-}|^2}{1 - |\tilde{a}_m^2 \tilde{r}_{m,m+1} \tilde{r}_{m-}|^2}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

式 (4) 便是部分相干模型给出的透射率和反射率.

## 2 部分相干模型实用性讨论

为了讨论本文提出的部分相干模型的误差, 我们将这种近似计算结果与采用傅里叶变换滤波计算结果相比较. 傅里叶变换滤波方法是先用完全相干近似算出光谱图, 再将光谱图用傅里叶变换转换到时间维上, 根据光束相干长度有限的物理学考虑, 将光谱图中时间过长

部分滤掉,而后把滤波后的时间维谱经傅里叶反变换回到频率维上得到相应光谱图.结果表明部分相干模型计算与傅里叶变换滤波方法所得结果十分相近,平均相对误差小于  $10^{-3}$ ,具体的误差频率分布由图 4 给出.更深入的数值计算表明,当材料的折射率较大时,部分相干模型会带来较大的误差,但一般这时材料的吸收是很大的,吸收会导致多光束叠加效应减弱,所以这时误差反而大大减小.对于衬底厚度在大于毫米量级的情况下,由部分相干模型带来的误差远远小于实验上可达到的测量灵敏度引起的误差.另外值得指出的是,部分相干模型计算方法在计算速度上要比傅里叶变换滤波方法快,并且要求很少的计算机内存,而傅里叶变换滤波方法当光谱范围较大时,所需内存会超出一般微机的内存.

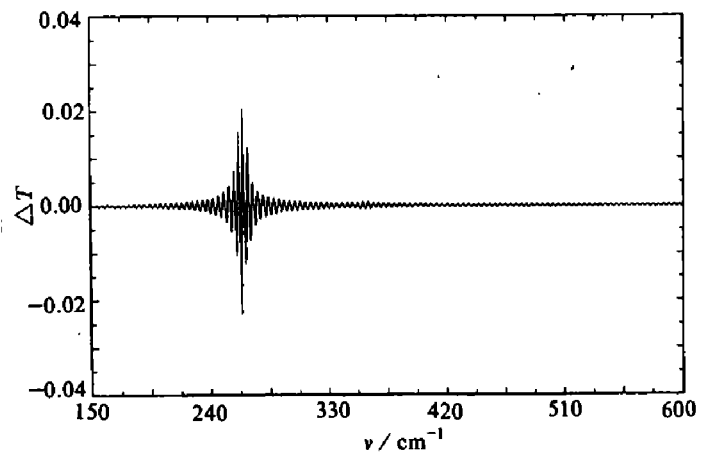


图 4 部分相干计算曲线与傅里叶变换计算曲线之差

Fig. 4 The difference between partial interference and Fourier transform calculated curves

为了进一步检验部分相干模型计算方法的实用性,我们对实验测得的 GaAs/AlGaAs 多量子阱材料的红外反射光谱进行了模拟计算.所用的参数均为 GaAs/AlGaAs 多量子阱材料在分子束外延生长时已确定的参数<sup>[4]</sup>.其中 GaAs 与 AlGaAs 光学声子模与自由载流子的等离子振荡激元对介电常数的贡献均有相应的体材料特性来描述<sup>[5]</sup>,计算所得的理论曲线如图 2 所示,与实验曲线吻合得非常好.结果表明,用光谱方法获得的厚度与材料生长过程中由反射式高能电子衍射振荡决定的膜厚之间差别小于 10%.但由于反射式高能电子衍射方法确定的厚度本身就有百分之几的误差,因此这样的吻合程度是令人满意的.另外,我们的计算及拟合表明,当厚度减小到纳米量级时,光学声子在红外反射谱中反映出来的光学特性仍可由体材料特性较好地描述,这与一些基本超晶格声子理论相符<sup>[6]</sup>.

### 3 结论

本文首次提出了解决多层膜光谱计算中,由于有限相干性导致的部分光束相干、部分光束不相干问题的部分相干计算方法.对这一方法的物理分析表明它完全适用于常见的具有较厚衬底(毫米量级)的外延薄膜实验光谱分析,且该方法简便快速,是一种很有实用价值的计算方法.

本文所提出的计算方法均有相应的微机 Fortran 软件.

**致谢** 作者十分感谢梁洁、刘普霖和穆耀明的有益讨论和帮助.

## 参考文献

- 1 沈学础. 半导体光学性质, 北京: 科学出版社, 1992
- 2 张立纲, 克劳斯·普洛洛. 分子束外延和异质结构, 上海: 复旦大学出版社, 1988
- 3 赵达尊, 张怀玉. 波动光学, 北京: 宇航出版社, 1988
- 4 Palik E.D. *Handbook of Optical Constants of Solids*, Orlando: Academic Press, 1985
- 5 Yuasa T, Naritsuka S, et al. *Phys. Rev.*, 1986,**B33**:1222
- 6 Barker A S, Merz J L Jr, Gossard A C. *Phys. Rev.*, 1987,**B17**:3181

## THE PARTIAL-INTERFERENCED MODEL CALCULATION OF THE SPECTROSCOPY FOR THE MULTI-QUANTUM WELLS\*

Ma Zhaohui Lu Wei Liu Xingquan  
Mao Huibing Qiu Yueming Shen Xuechu

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,  
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

**Abstract** The model calculation of the reflection spectroscopy for the multi-layer film system is discussed in detail. Considering the effect of interference length on the film system and the substrate, a simple and useful method to calculate the reflection spectroscopy is presented, and the predominance of this method can be seen from the calculation for the experimental spectroscopy.

**Key words** multi-layer film, spectroscopy, interference length.

---

\*The project supported by the National Natural Science Foundation of China.