

86-92

n型 AlAs/GaAlAs 量子阱子带间 正入射吸收跃迁振子强度*

徐文兰

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

傅英 M. Willander

(Department of Physics, University of Göteborg and Chalmers University of Technology, S-412 96, 瑞典)

TN213
0471.1

摘要 对n型电子有效质量各向异性半导体量子阱, 给出了子带间正入射吸收的振子强度解析表达式. 这种子带间的跃迁有束缚基态到束缚的激发态的, 有束缚基态到扩展的激发态的. 以AlAs/GaAlAs为例研究了量子阱生长方向、阱宽对量子阱吸收波长和振子强度的影响.

关键词 量子阱, 红外探测器, 正入射吸收, 振子强度.

半导体

引言

红外材料

与传统的窄禁带半导体红外探测器不同, n型宽禁带半导体材料红外量子阱探测器是利用导带子带间的光跃迁来耦合红外辐射的. 由于选择定则的限制, 一般的GaAs/GaAlAs等量子阱探测器必须用波导或光栅等结构, 才能响应正入射的红外辐射. 近年来, 已经发现电子有效质量各向异性的半导体量子阱结构可以直接吸收正入射光, 其吸收特性与量子阱的生长方向密切相关. 为了比较不同物理系统的光跃迁强度, 人们引入了一个无量纲量——振子强度. 量子阱的吸收系数正比于振子强度和二维电子态密度. 有许多文章计算过量子阱的振子强度, 如文献[1]计算了量子阱内从基态到激发的阱内束缚态和阱边扩展态的振子强度, 计算中只考虑了各向同性的有效质量, 计算结果就只能适应于平行入射光; 文献[2]、[3]虽然研究了电子有效质量各向异性的半导体量子阱对正入射光的响应, 但用了无穷深势阱模型近似, 这种近似不但对研究阱内束缚态有相当大的误差, 而且根本无法研究阱边的扩展态, 而后者对于提高量子阱的输运性能, 即提高探测率是至关重要的.

本文作者曾系统地研究过电子有效质量各向异性的半导体量子阱结构正入射辐射的吸收问题^[3~6], 我们关于正入射辐射吸收方向特性的解析推导, 提供了研究正入射吸收跃迁振子强度的方法. 本文在简明介绍电子有效质量各向异性半导体量子阱结构正入射辐射的吸收机理后, 分别给出了电子从基态到束缚的激发态和扩展的激发态的振子强度计算公式; 以AlAs/GaAlAs量子阱结构为例进行了具体的计算, 并与已有的实验作了比较; 研究了量子阱参数, 如生长方向、阱宽等对振子强度的影响. 相信这些研究对研制能直接响应正入射

*国家自然科学基金资助项目, 编号 69477023

本文 1996 年 9 月 16 日收到, 修改稿 1996 年 11 月 28 日收到

光的量子阱红外探测器会有所帮助.

1 子带间正入射光跃迁振子强度

设量子阱生长方向为 z 轴, 导带子带间的跃迁其实就是 z 方向包络函数间的跃迁. 对于任意阱宽为 L 、阱深为 V 的方阱, 阱内总有一个束缚的基态, 其包络函数 φ_0 为

$$\varphi_0 = \begin{cases} A_0 \exp(k_{0b}z), & z < -L/2 \\ B_0 \cos k_{0w}z, & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A_0 \exp(-k_{0b}z), & z > L/2 \end{cases} \quad (1)$$

而阱内只有一个束缚激发态的条件为

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \leq \frac{m_0 L^2 V}{W_{\text{sc}(w)}} < 2\pi^2 \hbar^2. \quad (2)$$

这个束缚的激发态为

$$\varphi_1 = \begin{cases} -A_1 \exp(k_{1b}z), & z < -L/2 \\ B_1 \sin k_{1w}z, & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A_1 \exp(-k_{1b}z), & z > L/2 \end{cases} \quad (3)$$

当阱参数不满足条件(2)左边的不等式时, 第一激发态就到了阱外, 成为扩展态, 这些扩展态都是奇偶两两兼并的. 式(2)右边的不等式则是限制阱内进入第三个束缚态的. 与偶对称基态能构成非零光跃迁的扩展态是奇对称的, 即

$$\varphi_1 = \begin{cases} A_1 \sin[k_{1b}z - \alpha], & z < -L/2, \\ B_1 \sin k_{1w}z, & -L/2 \leq z \leq L/2 \\ A_1 \sin[k_{1b}z + \alpha], & z > L/2 \end{cases} \quad (4)$$

式(4)中 $k_{0w} = (2E_0 m_0)/W_{\text{sc}(w)}^{1/2}/\hbar$, $k_{0b} = [2(V - E_0)m_0/W_{\text{sc}(b)}]^{1/2}/\hbar$, $k_{1w} = (2E_1 m_0)/W_{\text{sc}(w)}^{1/2}/\hbar$, $k_{1b} = [2(|V - E_1|)m_0/W_{\text{sc}(b)}]^{1/2}/\hbar$.

这里, m_0 为电子质量, E_0 和 E_1 分别为基态和激发态的能量, $W_{\text{sc}(w)}$ 、 $W_{\text{sc}(b)}$ 为阱(w)和垒(b)的倒有效质量对角矩阵元. 所谓倒有效质量矩阵, 就是有效质量矩阵 $\vec{M} = \vec{M}^{-1}$ 的逆, 稍后, 我们将给出它们的计算公式. 基态波函数的归一因子 A_0 、 B_0 分别为

$$B_0 = L^{-1/2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2k_{0b}L} + \frac{\sin(k_{0w}L)}{2k_{0w}L} + \frac{\cos(k_{0w}L)}{2k_{0b}L} \right]^{-1/2},$$

$$A_0 = B_0 \cos \left[\frac{k_{0w}L}{2} \right] \exp \left[\frac{k_{0b}L}{2} \right].$$

束缚的第一激发态波函数的归一因子为

$$B_1 = L^{-1/2} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2k_{1b}L} + \frac{\sin(k_{1w}L)}{2k_{1w}L} + \frac{\cos(k_{1w}L)}{2k_{1b}L} \right]^{-1/2},$$

$$A_1 = B_1 \sin \left[\frac{k_{1w}L}{2} \right] \exp \left[\frac{k_{1b}L}{2} \right].$$

扩展的阱边激发态波函数的归一因子为

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{L+b}}, \text{ 当 } (L+b) \gg L$$

$$B_1 = A_1 \left[\sin^2 \left(\frac{k_{1w}L}{2} \right) + \left(\frac{W_{xz(w)}k_{1w}}{W_{xz(b)}k_{1b}} \right) \cos^2 \left(\frac{k_{1w}L}{2} \right) \right]^{-1/2},$$

$$\alpha = \sin^{-1} \left[\frac{B_1}{A_1} \sin \left(\frac{k_{1w}L}{2} \right) \right] - \frac{k_{1b}L}{2}.$$

束缚态的能量 E_0 和 E_1 由下列方程决定:

$$W_{xz(b)}k_{0b}\cos(k_{0w}L/2) = W_{xz(w)}k_{0w}\sin(k_{0w}L/2),$$

$$W_{xz(w)}k_{1w}\cos(k_{1w}L/2) = -W_{xz(b)}k_{1b}\sin(k_{1w}L/2). \quad (5)$$

对于偶对称的基态,任何一个奇对称的扩展态都能成为跃迁的终态,因此,扩展态的能量 E_1 应由入射辐射的能量决定.由波函数的精确表达式,就可以推导出计算振子强度的公式.从基态到激发态的正入射振子强度为

$$f(E_1 - E_0) = \frac{2}{m_0(E_1 - E_0)} |\langle \Psi_1 | \vec{A} \vec{W} \vec{P} | \Psi_0 \rangle|^2$$

$$= \frac{2\hbar^2}{m_0(E_1 - E_0)} \left(W_{xz(w)} \langle \phi_1 | \frac{d}{dz} | \phi_0 \rangle_w + W_{xz(b)} \langle \phi_1 | \frac{d}{dz} | \phi_0 \rangle_b \right)^2. \quad (6)$$

以上假设入射辐射的矢势 $A_x=1, A_y=A_z=1$, 即是正入射.式(6)中 $W_{xz(w)}$ 和 $W_{xz(b)}$ 为阱和垒的倒有效质量非对角矩阵元,正是它们的存在,正入射振子强度才不为零.电子有效质量各向同性的半导体量子阱结构如 GaAs/GaAlAs,有效质量和倒有效质量矩阵都是对角的,因此不吸收正入射辐射.在我们已报道的文献[3~5]中,曾详细地讨论这个问题,并给出了倒有效质量矩阵元的计算公式为:

$$W_{xz(w,b)} = \sqrt{a(1-a)}(w_{t(w,b)} - w_{l(w,b)}),$$

$$W_{xx(w,b)} = (1-a)w_{t(w,b)} + aw_{l(w,b)}. \quad (7)$$

式中, $w_{t(w,b)}$ 和 $w_{l(w,b)}$ 分别为阱和垒的横有效质量倒数和纵有效质量倒数, a 是由量子阱生长方向 $[lmn]$ 决定的参数; $a=0$ 和 $a=1$ 表示量子阱生长方向与导带电子的椭球等能面主轴一致,倒有效质量非对角矩阵元为零,这样的量子阱结构也不能吸收正入射光.关于参数 a 的引入以及它与量子阱生长方向关系的推导详见文献[5].经过简单的代数运算后可得从基态到激发的阱内束缚态的振子强度为

$$\begin{aligned}
 f &= \frac{8 \hbar^2}{m_0(E_1 - E_0)} (W_{xx(w)} B_0 B_1 k_{0w} \int_0^{L/2} \sin(k_{0w} z) \sin(k_{1w} z) dz - \\
 &\quad W_{xx(b)} A_0 A_1 k_{0b} \int_{L/2}^{\infty} \exp(-k_{0b} z) \exp(-k_{1b} z) dz)^2 \\
 &= \frac{8 \hbar^2}{m_0(E_1 - E_0)} \left(\frac{W_{xx(w)} B_0 B_1 k_{0w}}{2(k_{1w}^2 - k_{0w}^2)} \{ (k_{1w} + k_{0w}) \sin[(k_{1w} - k_{0w}) L/2] - \right. \\
 &\quad \left. (k_{1w} - k_{0w}) \sin[(k_{1w} + k_{0w}) L/2] \} - \frac{W_{xx(b)} A_0 A_1 k_{0b}}{(k_{0b} + k_{1b})} \exp[-(k_{0b} + k_{1b}) L/2] \right)^2, \quad (8)
 \end{aligned}$$

从基态到激发的阱边扩展态的振子强度为

$$\begin{aligned}
 f &= \frac{8 \hbar^2}{m_0(E_1 - E_0)} \left[(W_{xx(w)} B_0 B_1 k_{0w} \int_0^{L/2} \sin(k_{0w} z) \sin(k_{1w} z) dz + \right. \\
 &\quad \left. W_{xx(b)} A_0 A_1 k_{0b} \int_{L/2}^{\infty} \exp(-k_{0b} z) \sin(k_{1b} z + \delta) dz - \right]^2 \\
 &= \frac{2 \hbar^6}{m_0^3(E_1 - E_0)^3} \left(0.5 W_{xx(w)} W_{xx(w)} B_0 B_1 k_{0w} \{ (k_{1w} + k_{0w}) \sin[(k_{1w} - k_{0w}) L/2] - \right. \\
 &\quad \left. (k_{1w} - k_{0w}) \sin[(k_{1w} + k_{0w}) L/2] \} + \right. \\
 &\quad \left. W_{xx(b)} W_{xx(b)} A_0 A_1 k_{0b} \exp(-k_{0b} L/2) [(k_{1b} \cos \delta + k_{0b} \sin \delta) \cos(k_{1b} L/2) - \right. \\
 &\quad \left. (k_{1b} \sin \delta - k_{0b} \sin \delta) \sin(k_{1b} L/2)] \right)^2, \quad (9)
 \end{aligned}$$

2 计算和讨论

本文以 AlAs/Ga_{1-x}Al_xAs 为例计算振子强度. 当 Al 组份 $x > 0.45$ 时, Ga_{1-x}Al_xAs 是非直接带隙的材料, AlAs/Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱是 I 型的, AlAs 是阱材料. 目前已有研制 AlAs/Ga_{1-x}Al_xAs 长波长探测器的报道^[7]. 我们在计算中所用的材料参数取自文献[8]: $V = 0.125(1-x) + 0.143(1-x^2)$ (eV), $w_{l(w)} = 1/0.19m_0$, $w_{l(w)} = 1/1.1m_0$, $w_{l(b)} = 1/[0.19x + 0.23(1-x)]m_0$, $w_{l(b)} = 1/[1.1x + 1.3(1-x)]m_0$.

用文献[7]的量子阱参数(阱宽 L 为 30 Å, 垒宽 b 为 500 Å, 组份 x 为 0.5, 垒高 $V = 170$ meV, 生长方向为 [110]), 对主主轴为 [100] 的能谷, 计算了电子的能级, 参数 $a = 0.5$, 阱内有两个束缚态: $E_0 = 50$ meV, $E_1 = 163$ meV, 从基态到束缚的激发态的振子强度为 $f = 1.62 \times 10^{-3}$. 图 1 给出了基态到扩展态的振子强度吸收波长的变化. 我们把振子强度极大的态认为是文献[7]的 E_2 态, $E_2 = 180$ meV, $f = 3.61 \times 10^{-2}$. 我们的计算结果与文献[7]并不一致. 我们认为文献[7]中采用的有效质量 m^* 的概念和数据都是不确切的. 对于非直接带隙半导体材料, 电子的有效质量有纵横之分, 在计算中还要考虑到有效质量在生长方向的投影等, 如果在我们的计算中, 硬把 $W_{xx(w)}$ 和 $W_{xx(b)}$ 取作该文表 1 用的 m^* , 即 $0.78m_0$ 和 $0.82m_0$, 则上述 3 个能量分别为 28、107、270 meV, 倒是符合文献[7]了. 这从一个方面验证了我们计算方法的正确性. 下文的计算中还是采用我们的有效质量公式. 文献[7]中 AlAs 阱上的

E_3 — E_6 态其实是 X 谷和 Γ 谷的混合, 本文不予讨论.

已有许多文献研究过量子阱的能级随阱宽和垒高的变化. 从前面的讨论中可知, 量子阱生长方向也是调节量子阱能级的一个重要参数, 这是通过有效质量在生长方向上的投影 W_{xx} 即参数 a 来实现的, 参见公式(5)和(7). 现在, 我们改变生长方向, 仍采用文献[7]的其它量子阱参数进行计算, 图2给出了从基态跃迁到第一激发态的振子强度 f (实线) 以及相应的吸收波长 (点划线) 随参数 a 的计算结果. 由公式(2)、(7)可知, 当 $a < a_c = (\omega_c - 2m_0L^2V/\pi^2)/\hbar^2/(\omega_c - \omega_l)$ 时, 阱内只有一个束缚的基态, 这里 $a_c = 0.274$, 此时应用式(9)计算; 而当 $a \geq a_c$ 时, 阱内会有两个束缚态, 用式(8)计算. 作为对比, 虚

线表示无穷深阱模型的振子强度 $f = (256/27/\pi^2)W_{xx}^2(w)/W_{xx}(w)$. 当 $a = a_{max} = 1/1 + \sqrt{\omega_l/\omega_c}$ 时, 振子强度可达到极大值. 对 $AlAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ 体系, $a_{max} = 0.71$. $AlAs/Ga_{0.5}Al_{0.5}As$ 的阱很浅 (0.17eV), 用无穷深势阱模型显然是不准确的, 我们的计算应该更为真实. 从式(8)可以看出, 垒区对振子强度的贡献是负的, 这是由垒区基态和束缚激发态波函数的特点所决定的. 在无穷深势阱中, 垒区的波函数为零, 波函数全集中在阱区, 因此振子强度比有限深势阱要大. 无穷深势阱没有连续态, 曲线在 $a < a_c$ 时仍对应束缚态之间的跃迁.

取参数 $a = 0.5$, 图3给出了振子强度和吸收波长随阱宽变化的计算结果. 同样, 由于阱宽的变化, 阱内束缚态的数目会有变化. 当 $L < L_c = \sqrt{\pi^2 \hbar^2 W_{xx} / 2m_0 V}$ 时 ($L_c = 26.13 \text{ \AA}$), 阱内只有一个束缚的基态, 计算结果相应于到连续态的跃迁. 而在 $L \geq L_c$ 时, 计算了束缚态之间的跃迁. 图3没有给出无穷深阱模型的计算结果, 曲线的符号含义同图2.

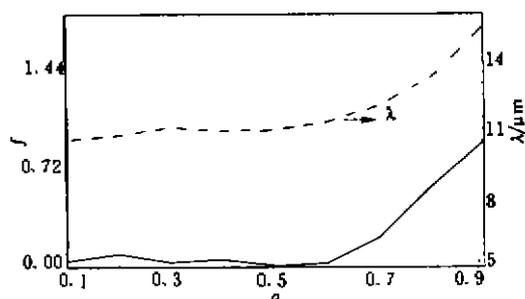


图2 振子强度和吸收波长随参数 a 变化的计算结果

Fig. 2 The oscillator strength and the absorption wavelength vs the parameter a

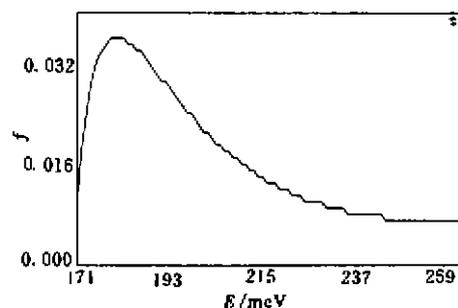


图1 从基态到扩展态的振子强度与吸收波长的关系

Fig. 1 The oscillator strength of intersubband transition between the ground state and the extended excited state vs the absorption wavelength

线表示无穷深阱模型的振子强度 $f = (256/27/\pi^2)W_{xx}^2(w)/W_{xx}(w)$. 当 $a = a_{max} = 1/1 + \sqrt{\omega_l/\omega_c}$ 时, 振子强度可达到极大值. 对 $AlAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ 体系, $a_{max} = 0.71$. $AlAs/Ga_{0.5}Al_{0.5}As$ 的阱很浅 (0.17eV), 用无穷深势阱模型显然是不准确的, 我们的计算应该更为真实. 从式(8)可以看出, 垒区对振子强度的贡献是负的, 这是由垒区基态和束缚激发态波函数的特点所决定的. 在无穷深势阱中, 垒区的波函数为零, 波函数全集中在阱区, 因此振子强度比有限深势阱要大. 无穷深势阱没有连续态, 曲线在 $a < a_c$ 时仍对应束缚态之间的跃迁.

取参数 $a = 0.5$, 图3给出了振子强度和吸收波长随阱宽变化的计算结果. 同样, 由于阱宽的变化, 阱内束缚态的数目会有变化. 当 $L < L_c = \sqrt{\pi^2 \hbar^2 W_{xx} / 2m_0 V}$ 时 ($L_c = 26.13 \text{ \AA}$), 阱内只有一个束缚的基态, 计算结果相应于到连续态的跃迁. 而在 $L \geq L_c$ 时, 计算了束缚态之间的跃迁. 图3没有给出无穷深阱模型的计算结果, 曲线的符号含义同图2.

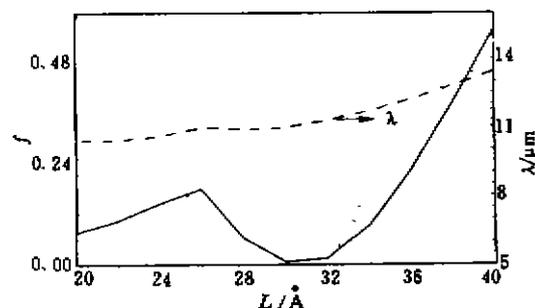


图3 振子强度和吸收波长随阱宽变化的计算结果

Fig. 3 The oscillator strength and the absorption wavelength vs the well width

从图 2 和图 3 可以看到,在临界的 a_c 和 L_c 处,即束缚激发态和扩展激发态的交界处,振子强度有一个小小的极大.而对应于横坐标较大处,振子强度也增大.这表明激发的束缚态离阱边比较远,波函数比较局域,与基态的交叠比较大,因而振子强度就大.

当组分 x 再大, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的垒就更低,阱更浅,对应的吸收波长就会到红外波段以外,因此本文不讨论振子强度随组分的变化.

现在来讨论共振态的问题.前面提到,在阱参数满足式(2)时,阱内有两个束缚态,式中的等号表明,束缚的第一激发态被推到阱边,此时 $E_1=V$,成为共振态.从扩展态波函数表达式可见,此时阱区波函数的振幅比起其他高于垒高的能量状态达到极大.但如前所述,由于有限深阱振子强度不但与阱内的波函数有关,也与垒内的波函数有关,振子强度并未达到极大.数值计算也确实表明了这一点.

在 AlAs 体材料中, X 电子的 6 个能谷是简并的.在 AlAs/Ga $_{1-x}$ Al $_x$ As 量子阱中, X 电子能谷会发生劈裂.由于晶格失配很小,忽略张力,可认为 X 电子能谷的简并度完全由电子在生长方向上的有效质量 W_x 决定.由 W_x 表达式(7)可知,当生长方向 $[l, m, n]$ 中所有指数都相等时, 6 个能谷仍然是简并的,有 2 个指数相等时,则 6 个能谷分为四度和两度简并.如所有指数都不等, 6 个能谷就只有两两简并了.电子按最低能级填充,总的振子强度应为各占有谷的平均.因此,对 $[110]$ 生长方向, $[100]$ 和 $[010]$ 4 个能谷是简并的.如电子占据所有的 6 个能谷,则总振子强度为 4 个占据谷振子强度的平均.因为对 $[001]$ 谷, $a=0, W_x=0$, 该谷等能面主轴和生长方向一致,对正入射辐射不吸收.文献[5]在考虑了能谷的简并度和占据度后,找到了使 AlAs/Ga $_{1-x}$ Al $_x$ As 量子阱正入射吸收达到极大的生长方向 $[110]$,但这是用无穷深阱模型得到的结论.对有限深阱,可以仿照文献[5]的方法,即从掺杂的电子浓度求出费密面的位置,以确定电子占有能谷,然后再用本文提供的公式对占有谷一一计算,本文不再赘述.

3 结论

以上的计算和讨论说明了除通常的阱宽、垒高外,量子阱的生长方向也是调节量子阱光电性能的一个重要参数.尤其在考虑对正入射光的吸收时,生长方向是决定有没有吸收的关键参数.计算包括了束缚基态到束缚的激发态和扩展的激发态的两种跃迁.我们对 AlAs/GaAlAs 量子阱的计算完全可以推广到其它 n 型电子质量各向异性半导体量子阱体系,从而对吸收红外正入射光的量子阱探测器的设计提供了参考.

参考文献

- 1 Liu H C. *J. Appl. Phys.*, 1993, **73**: 3062
- 2 Karunasiri R P G, Wang K L. *Semiconductor quantum well and superlattice for long-wavelength infrared detectors*. 1993: 161.
- 3 Xu Wenlan, Fu Ying, Willander M, et al. *Phys. Rev.*, 1993, **B48**: 11477
- 4 Xu Wenlan, Fu Ying, Willander M, et al. *Phys. Rev.*, 1994, **B49**: 13760
- 5 徐文兰,沈学础,傅英,等. *红外与毫米波学报*, 1995, **14**: 299
- 6 Xu Wenlan, Willander M. *J. Appl. Phys.*, 1994, **75**: 3208
- 7 Ho P, Marting P A, Yu L S, et al. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1993, **B11** (3): 935; Wang Y H, Li S S, Ho

- P, et al. *J. Appl. Phys.*, 1993, **74**:1382
8 Adachi S. *J. Appl. Phys.*, 1985, **58**:R1

OSCILLATOR STRENGTH OF INTERSUBBAND TRANSITION IN N-TYPE AlAs/GaAlAs QUANTUM WELL FOR THE NORMAL INCIDENT ABSORPTION*

Xu Wenlan

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

Fu Ying M. Willander

(Department of Physics, University of Göteborg and Chalmers University of Technology,
S-412 96 Göteborg, Sweden)

Abstract For the n-type semiconductor quantum well with anisotropic electron effective mass, the analytical expressions of oscillator strength of intersubband transition including both bound-to-bound and bound-to-extended excited states for the normal incident radiation were given. Taking the AlAs/Ga_{1-x}Al_xAs as an example, the influences of the growth direction of the quantum well and the well width on the absorption wavelength and the oscillator strength were investigated.

Key words quantum well, infrared detector, normal incident absorption, oscillator strength.

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