

量子台阶上准束缚电子能态光学性质研究*

陆卫 穆耀明¹ 刘兴权 陈效双 万明芳 李 宁 龚红飞 沈学础

(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;
中国高等微结构科技研究中心, 江苏, 南京, 210093)

TN201

摘要 给出量子台阶上准束缚电子能态间的跃迁特性, 通过理论计算模型中等效电子波函数相干长度对量子台阶光学特性的影响, 提出一种对电子波函数相干长度行为的实验研究途径.

关键词 量子台阶, 电子能态, 电子波函数, 光学特性.

引言

近年来人们愈来愈重视对光子晶体的研究. 在这一研究中人们试图将光子在晶体中的行为与电子在二维系统中的行为进行比较, 进而寻求一些类似于电子受限在二维结构中能态那样的光子态. 在这类比较中, 人们试图将受限在量子阱中的电子态与受限在 Fabry-Perot 干涉腔中的光子态相比较, 但在能量低于势垒高度时, 量子阱中电子态在势垒区的波矢 K 是一虚数, 从而与光子态并非完全相似. 但当电子在势垒上形成一些准束缚能态时, 这时的电子能态与束缚 Fabry-Perot 干涉仪的高介电函数区域中光子态有很好的可比性. 因此, 理解势垒上的电子能态无论对电子能态的应用还是与光子晶体的对比性研究都有很重要的意义. 作为一种最基本的研究势垒上电子能态的结构, 量子台阶是一种可能揭示很多基本物理特征(如光跃迁在台阶方向动量不守恒, 在台阶上形成很强的态密度起伏等)的重要物理体系^[1]. 本文将在 H. Shen 等人提出的理论模型^[2]基础上进一步引入等效电子波函数相干长度这一参量, 分析电子波函数相干长度行为对量子台阶光学性质的影响.

1 基本理论

类似于 H. Shen 的工作, 我们定义量子台阶势为

$$V = \begin{cases} -V_1, & z < 0 \\ 0, & 0 < z < L \\ \infty, & z > L \end{cases} \quad (1)$$

设 $z < 0$ 区域为区域 1, 该区域中的所有参量用下标 1 表示; 设 $0 < z < L$ 区域为区域 2, 该区域中的所有参量用下标 2 表示; 在 $z = L$ 处是半导体表面, 用无限高势代替真空势. 对 GaAs 这类半导体材料, 由于函数相对 V_1 要大几个电子伏能量, 所以取无限高势代替由功函数决定的势在能带边电子能态行为方面是合适的. 在式(1)表达的理想量子台阶上, 电子波函数

* 国家自然科学基金(编号 19525409, 696760) 和上海启明星计划资助项目
稿件收到日期 1997-11-14, 修改稿收到日期 1998-03-05

1

可以分成两部分,即在量子台阶上、下两个区域.区域 1 的波函数为平面波形式,为

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{1(c,v)} &= e^{-ik_1(c,v)z} + R_{(c,v)} \cdot e^{ik_1(c,v)z}, \\ R_{(c,v)} &= e^{i\varphi_{(c,v)}}, \\ \varphi_{(c,v)} &= 2 \tan^{-1}[\eta_{(c,v)} \cdot \tan(k_{2(c,v)}L)], \\ \eta_{(c,v)} &= k_{1(c,v)}m_{2(c,v)}/k_{2(c,v)}m_{1(c,v)}, \\ k_{1(c,v)} &= 2\pi\sqrt{2m_{1(c,v)}(E_{L(c,v)} + V_{(c,v)})}/h. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

其中波矢为 $k_{1(c,v)}$ 和 $k_{2(c,v)}$, $m_{2(c,v)}$ 为有效质量.在区域 2 的波函数会在某些特别的波矢值上会形成一种准驻波形式的函数,即

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{2(c,v)} &= A_{(c,v)} \cdot \sin[k_{2(c,v)}(z - L)], \\ A(c,v) &= 2\eta_{(c,v)}/\eta_{(c,v)} \sin(k_{2(c,v)} \cdot L) + i \cos(k_{2(c,v)} \cdot L). \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

式(2),(3)所表达的电子波函数形式决定的沿台阶方向上的态密度为

$$n_{L(c,v)}E_{L(c,v)} = \frac{1}{2\pi L} \frac{F_{c,v}}{1 + F_{c,v}^2 E_{L(c,v)}} \frac{1}{E_{L(c,v)}} \left[\frac{2k_{2(c,v)}L}{\sin(2k_{2(c,v)}L)} - \frac{V_1}{E_{L(c,v)} + V_1} \right]. \quad (4)$$

其中 $F_{c,v} = \eta_{(c,v)} \tan(k_{2(c,v)}L)$ 由式(2)可得,在 $k_2 = m\pi/2L$ 时态密度会出现一些极大值,这也正是电子在台阶势上形成准驻波的条件.有了电子波函数在区域 1 和区域 2 中的基本形式式(2)和(3),我们还需要进一步考虑波函数的归一问题.由于电子波函数的相干长度在实际体系中总是有限的,所以在区域 1 中波函数呈现的行波在传输到一定距离后不再与处在台阶势上方的波函数相干.描述这一行为十分复杂,所以我们引入一个等效相干长度 L_c .认为在 $z > -(L_c - L)$ 区域的波函数完全不相干,并进一步设定处于任一能态上的电子和空穴波函数都具有相同等效相干长度 L_c .显然,这一理论过于简单,但该模型确实能反映出电子波函数具有有限相干长度这一特性.有了这一基本模型,电子波函数就有了归一化的形式

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{c,v} &= 0, \quad z < -(L_c - L) \\ \Psi_{c,v} &= \Psi_{1c,v}/W_{c,v}, \quad -(L_c - L) < z < 0 \\ \Psi_{c,v} &= \Psi_{1c,v}/W_{c,v}, \quad 0 < z < L \\ \Psi_{c,v} &= 0, \quad z > L \\ W_{c,v} &= 2L_c + \frac{\sin(2k_{1(c,v)} \cdot L_c + \varphi) - \sin(\varphi)}{k_{1(c,v)}} + \frac{|A_{c,v}|^2}{2} \cdot \frac{L - \sin(2k_{2(c,v)}L)}{2k_{2(c,v)}} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

其中 $A_{c,v} = -2\eta_{(c,v)}/\eta_{(c,v)} \cdot \sin(k_{2(c,v)}L) + i \cos(k_{2(c,v)}L)$.根据波函数式(5)和 H. Shen 提出的理论模型,可以得到量子台阶体系的吸收系数为

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{4\pi^2 e^2}{n C_0^2 \omega} \cdot |M_{cv}^E|^2 J_{Em}, \\ J_{Em} &= \frac{16\mu}{h^2 L} \iint n_{Lc}(E_{Lc}) n_{Lv}(E_{Lv}) |M_{cv}^{Em}|^2 \theta(h\omega - E_c - E_{Lc} - E_{Lv}) dE_{Lc} dE_{Lv}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

式(6)中 μ 为折合质量, θ 为台阶函数, M_{cv}^{Em} 为跃迁矩阵元包络函数分量,有

$$M_{cv}^{E_m} = \frac{i}{4\pi} \cdot \frac{A_c A_v^* \left(\frac{\sin[(k_{2c} - k_{2v})L]}{k_{2c} - k_{2v}} - \frac{\sin[(k_{2c} + k_{2v})L]}{k_{2c} + k_{2v}} \right)}{\sqrt{W_c W_v}} + e^{i\frac{E_c - E_v}{2}} \delta(k_c - k_v).$$

根据式(6)可知光谱的结构完全由 J_{E_m} 决定, 其它部分是能量的慢变函数, 所以我们主要计算 J_{E_m} 谱.

2 计算结果分析

我们用式(6)计算了由超薄层 $\text{Ga}_{0.76}\text{Al}_{0.24}\text{As}$ (其禁带宽度为 $E_g = 1721\text{eV}$) 形成的量子台阶的光谱特性, 样品结构是在 GaAs 衬底上形成一层厚度为 $L = 25\text{nm}$ 的 $\text{Ga}_{0.76}\text{Al}_{0.24}\text{As}$ 薄膜. 这样对应式(1)中的区域 1 是 GaAs , 区域 2 是 $\text{Ga}_{0.76}\text{Al}_{0.24}\text{As}$, 真空区域则代表无限高势. 计算中采用的相应参量为 $V_{1,v} = 0.082\text{eV}$, $V_{1,c} = 0.15\text{eV}$, $m_{1,v} = 0.34m_0$, $m_{2,v} = 0.36m_0$, $m_{1,c} = 0.066m_0$, $m_{2,c} = 0.076m_0$. 由上述这些参量和上节模型中的电子波相干长度 L_c 可算出相应的吸收光谱. 图 1 给出了不同 L_c 值时理论上与吸收光谱成正比的联合态密度值 J_{E_m} . 从图 1 中可见, 随着 L_c 的不断增大, J_{E_m} 值不断变小, 同时阶梯式的 J_{E_m} 谱结构逐步地变得平滑; 当 L_c 取为 $1\mu\text{m}$ 时, J_{E_m} 谱几乎演变成一个单一的台阶, 处于能量较高两个台阶变得几乎不能分辨. 这种随与电子波函数相干性相关的 L_c 模型参量变化的规律源于台阶势上一些准束缚态波函数行为. 在式(1)所示的台阶势中, 电子波函数是由区域 1 中的平面波和区域 2 中的正弦波组成. 当正弦波的波矢正好使区域 2 中波函数形成准驻波形式的波函数时, 台阶上电子能态密度出现极大值, 相应的波矢为 $k_2/m\pi/2L$ ($m = 1, 2, 3, \dots$). m 愈大, 区域 1 中平面波前系数绝对值与区域 2 中正弦波前系数绝对值 (ρ_m) 的比值愈大. 即在特定的 L_c 值下, ρ_m 随 m 上升而增大, 对价带中的空穴台阶存在完全对称的物理图象, 带间的准束缚态跃迁矩阵元在具有相同态密度极值级次的态之间较大. 由于区域 1 导带和价带中平面波部分的波函数交叠积分为零, 对吸收有贡献的只有区域 2 的波函数. 所以当 m 上升时 ρ_m 增大,

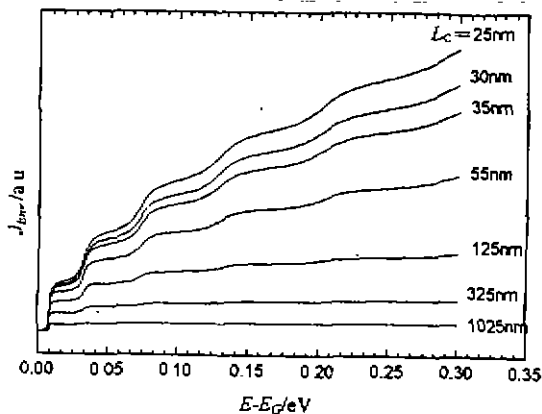


图 1 不同 L_c 值理论上与吸收光谱成正比的联合态密度值 J_{E_m}

Fig. 1 The theoretical spectra of the joint density of states (J_{E_m}) for different L_c value

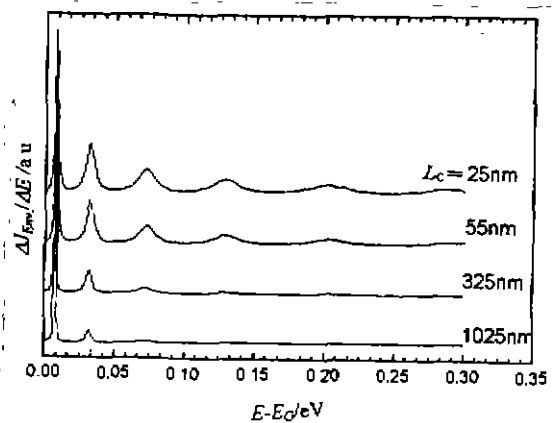


图 2 相对第一个归一峰的 $\Delta J_{E_m} / \Delta E$ 谱

Fig. 2 The normalized spectra for $\Delta J_{E_m} / \Delta E$ relative to the first peak

即区域 2 的波函数在该态相应波函数中占有比例下降,从而引起如图 1 所示的级次高的 J_{Em} 台阶比级次低的台阶要弱. 当 L_c 等于量子台阶宽度时,整个波函数只含有正弦波部分, J_{Em} 谱中的台阶高度几乎不随级次的高低而变化. 而当 $L_c \geq L$ 时,整个波函数中平面波成份远大于正弦波成份, ρ_m 随 m 上升而增大使 J_{Em} 谱中台阶高度减小效应被充分地反映出来. 所以,当 L_c 从 $L_c = L$ 逐步发展到 $L_c \geq L$ 时,不同级次的 J_{Em} 台阶高度会发生图 1 所示的变化. 为了能更好地看清这一变化,图 2 给出了 $\Delta J_{Em}/\Delta E$ 谱. 这些谱都是相对第一个峰的归一谱. 由图 2 可见,当 L_c 从 L 值(25nm)增加到 1000nm 时,高级次的峰相对第一个峰有显著的减小. 因此上节模型中的等效电子波函数相干长度参量 L_c 确实对台阶势中准束缚电子态间光跃迁吸收(尤其是微分吸收谱)有很大影响.

图 3(a) 给出测得的与本文计算样品完全一致样品的光调制反射光谱. 为了与实验作比较,光调制反射谱也是一种能较好代表微分吸收光谱的实验谱,我们采用洛仑兹线型

$$\frac{\Delta R}{R} = \sum_{j=1}^k \text{Re}(S_j \exp(i\varphi_j) \cdot (E - E_j - i\gamma_j)^{-2}) \quad (7)$$

拟合该实验光谱. 式(7)中 k 是光谱峰个数, E, S_j, φ_j, E_j 和 γ_j 为光子能量、强度、位相、跃迁能量及弛豫因子. 拟合曲线由实线(a)所示,与实验结果完全吻合. 再取拟合参量中的位相 φ_j 为零,得到可直接与理论算得的 $\Delta J_{Em}/\Delta E$ 谱相比较的不受位相角影响的由拟合实验光谱演变的光谱,见图 3(b). 比较光谱(b)与图 2 中的理论 $\Delta J_{Em}/\Delta E$ 谱,可得在本文的样品和实验条件下,样品的模型参量 L_c 取 60nm 较合适,至少可以给出 L_c 的范围在 $25\text{nm} < L_c < 100\text{nm}$. 另外,整个光谱强度与线宽跃迁峰级次的变化特性,其理论计算与实验很一致.

由以上分析可见,由于 $\Delta J_{Em}/\Delta E$ 谱中各级次峰强度相对 L_c 的很强依赖关系,使我们有可能通过对这类样品微分吸收或反射光谱的测量研究其电子波函数的相干行为. 图 2 所示的不同等效电子波函数相干长度特性对可观察的微分光谱中各光跃迁峰的影响还可用于设计一种新的实验,即电子的相干性随温度的变化行为. 当温度从低温升向高温时,电子波函数感受到的声子散射强度会不断增大,从而电子波函数的相干长度会不断减小. 从图 2 的理论结果看,实验上微分光谱中

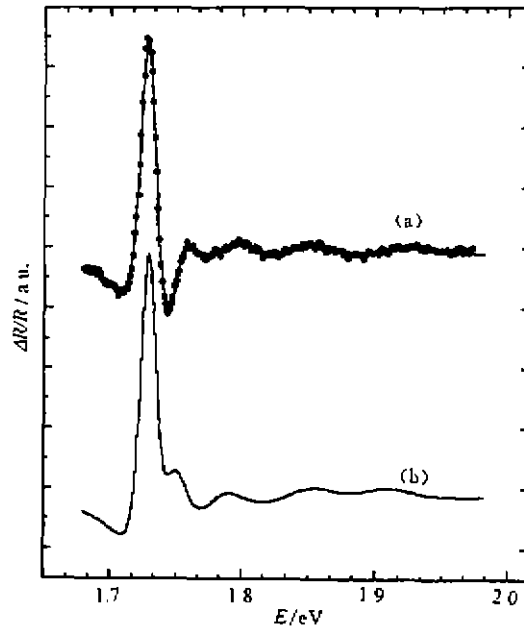


图 3 圆点为实验测得的调制反射光谱,(a)洛仑兹线型拟合曲线,(b)拟合参量中的位相 ϕ_j 为零时由拟合实验光谱演变的光谱
Fig. 3 The experimentally measured modulated photo-reflection spectrum (dots), the fitting line by the Lorentzian formula (solid line (a)), and the spectrum by taking the fitting parameter ϕ_j to be zero (solid line (b))

的高级次跃迁峰相对低级次跃迁峰的比例会有所增大. 另外, 可以通过把本文中区域 1 中的 GaAs 材料换成 InGaAs 混晶材料, 来研究混晶无序对电子波函数相干长度的影响. 总之, 我们有可能通过量子台阶结构, 采用微分光谱的方法系统地研究材料中电子波的相干特性.

3 结论

本文针对量子台阶系统计算了与电子准束缚态的带间跃迁相关的光学特性, 并解释了已报道的实验结果. 同时展示了在量子台阶中, 电子波与光波在光学薄膜中传输时形成一些驻波行为的很强可比性, 从而预示了一种可仿照光学研究光波相干性方法去研究电子波相干性的可能性.

致谢 感谢徐文兰, 胡灿明, 戴宁, 黄大鸣等同志富有启发性的讨论.

REFERENCES

- 1 XIA Jiang-Bai, ZHU Bang-Feng. *Semiconductor Superlattice Physics*. Shanghai: Shanghai Scientific and Technological Publishing House (夏建白, 朱邦芬. 半导体超晶格物理, 上海: 上海科技出版社), 1995
- 2 Shen F H Pollak, Tsu R. *Appl. Phys. Lett.* 1990, **57**, 13
- 3 LIU Xing-Quan, LU Wei, MU Yao-Ming. *Chinese Journal of Physics* (刘兴权, 陆卫, 穆耀明. 物理学报), 1997, **46**, 1613

OPTICAL PROPERTIES OF THE QUASI-BOUND ELECTRONIC STATES ABOVE QUANTUM STEP*

LU Wei MU Yao-Ming LIU Xing-Quan CHEN Xiao-Shuang

WAN Ming-Fang LI Ning DOU Hong-Fei SHEN Xue-Chu

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China; Center for Advanced Study of Science and Technology of Microstructure, Nanjing, Jiangsu 210093, China)

Abstract The optical transition behavior between the quasi-bound electronic states above the quantum steps was presented. A new experimental study method was proposed to investigate the electron wavefunction coherence length by the results from the theoretical study on the dependence of optical properties of quantum steps on the equivalent electron wavefunction coherence length.

Key words quantum step, electronic state, electron wavefunction, optical property.

* The project supported by the National Natural Science Foundation of China and Shanghai Qi Ming Xing Foundation

Received 1997-11-14, revised 1998-03-05