

GaAs/AlGaAs MQW 子带吸收 及其 Stark 效应的理论与实验研究*

吴 云 陈 正 豪

(中国科学院物理研究所 北京 100080)

刘 胜 茂

(清华大学物理系 北京 100084)

摘要 本文采用 Kronig-Penney 模型及无限深势阱等效法对方势阱结构的子带能级及其 Stark 效应进行了理论推导和数值计算，并与其它近似法作了比较。实验上，研究了 GaAs/AlGaAs 方阱结构的子带吸收及其 Stark 效应，分析了实验结果。

PACC: 6865, 7155, 7820J, 7280E

1 引言

近几年来，由于半导体材料生长技术的提高，生长出原子尺度的半导体层状结构已经成为现实。将晶格常数匹配良好，禁带宽度不同的半导体材料交替生长而成的多量子阱(MQW)和超晶格结构(如 GaAs/AlGaAs、InGaAs/AlInAs 等)引起了科学界的注意。由于量子阱中载流子的量子受限作用，使 MQW 和超晶格具有比半导体材料丰富得多的性质，如量子霍尔效应、室温激子吸收与饱和效应、子带吸收与饱和效应、相并联的开关和光学双稳效应、激子跃迁的 Stark 效应以及子带跃迁的 Stark 效应等，它们有着广泛的应用领域，对于它们的物理性质及应用价值的研究已经成为近年来国际性的热门课题。

MQW 的量子尺寸限制效应使其能带结构在 z 方向(生长方向)上是量子化的，也即是在量子阱导带中存在若干分离的子能带。当入射光场具有垂直于 MQW 生长面的分量时，就可以激发电子在子带间的光跃迁^[1,2]。理论和实验均表明，GaAs/AlGaAs MQW 导带内子带间光跃迁具有很强的红外吸收特性，跃迁的中心波长是 MQW 结构参量的函数，其范围可以以 $6\mu\text{m}$ 延伸到远红外。1987 年，Alex Harwit 等人率先观察到超晶格势阱的子带吸收的 Stark 效应^[3]。

这种效应是给 MQW 加上垂直于外延表面的电场，其子带吸收峰随之发生位移的现象。子带吸收峰的位移与所加电场强度及 MQW 的结构参量、结构对称性等均有明显的

* 国家自然科学基金资助项目

本文 1992 年 5 月 22 日收到

关系，并且不同于激子吸收峰的 Stark 位移^[4]。利用这一效应，可望制成调制波段为 6~14 μm，响应速度高达 10ps 的光开关与光调制器以及新型的光数字逻辑元件^[5]。因此人们对 MQW 的 Stark 效应的研究越来越浓厚。

本文首先用 Kronig-Penney 模型及无限深势阱等效法对 GaAs/AlGaAs 方阱结构的子带能级及其 Stark 位移进行了理论研究，给出了经数值计算后归纳总结出的子带能级及其 Stark 位移随有关参量变化的依赖关系，并与以连续阶梯阱近似^[6]及变分法^[7]计算所得的结果进行了比较。然后根据理论计算结果设计了若干样品，对这些样品进行了实验研究，观察到部分样品的 Stark 位移。文章最后对所观察到的实验现象进行了分析。

2 能量方程及数值解

根据 GaAs/AlGaAs 方阱的物质结构，导带中电子沿 z 方向(生长方向)的运动可以采用包络波函数近似，即其电子运动波函数可分解为以原子晶格为周期的 Bloch 波函数与包络波函数的乘积。子带跃迁中电子和终态的波函数几乎不变，变化明显的是包络波函数。因此可以将问题简化为一维多阱问题。

在未加电场情形，根据一维 Kronig-Penney 模型^[8]，导带中电子的包络波函数 φ 可由如下方程

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2\varphi}{dz^2} = E\varphi & \text{所有阱区域} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{d^2\varphi}{dz^2} + V_0\varphi = E\varphi & \text{所有垒区域} \end{cases} \quad (1)$$

及 Bloch 定理和熟知的边条件解出：

能量方程

$$\cos kd = \cos \lambda a \cdot \operatorname{ch} \beta b + \frac{1}{2} \left(\gamma - \frac{1}{\gamma} \right) \sin \lambda a \cdot \operatorname{sh} \beta b \quad (2)$$

波函数

$$\varphi = \begin{cases} \varphi_0 \left[\cos \lambda \left(z - nd + \frac{a}{2} \right) + p \sin \lambda \left(z - nd + \frac{a}{2} \right) \right] e^{iknd}, \\ \left(-\frac{a}{2} + nd \leq z \leq \frac{a}{2} + nd \right) \\ \varphi_0 \left[\operatorname{ch} \beta \left(z - nd + \frac{a}{2} \right) + \frac{p}{\gamma} \operatorname{sh} \beta \left(z + \frac{a}{2} - nd \right) \right] e^{iknd}, \\ \left(-\frac{d}{2} + nd \leq z \leq -\frac{a}{2} + nd \right) \\ \varphi_0 \left[\operatorname{ch} \beta \left(z - nd - d + \frac{a}{2} \right) + \frac{p}{\gamma} \operatorname{sh} \beta \left(z - nd - d + \frac{a}{2} \right) \right] e^{ik(n+1)d} \\ \left[\frac{a}{2} + nd \leq z \leq \left(\frac{1}{2} + n \right) d \right]. \end{cases} \quad (3)$$

其中 m_1 是 GaAs 层中电子的有效质量， m_2 是 AlGaAs 层中电子的有效质量， V_0 是方

阱势垒的高度, a 是阱宽, b 是垒宽(坐标原点选在阱底中心), φ_0 是归一化因子, 其余参数为:

$$\left\{ \begin{array}{l} n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left[\frac{N}{2} \right] \\ \lambda = (2m_1E/\hbar^2)^{1/2} \\ \beta = [2m_2(V_0 - E)/\hbar^2]^{1/2} \\ \gamma = \alpha\beta/\lambda, \alpha = m_1/m_2 \\ p = \frac{\text{ch}\beta b \cdot e^{ikd} - \cos\lambda a}{\sin\lambda a + \frac{1}{\gamma}\text{sh}\beta b \cdot e^{ikd}} \\ d = a + b \\ k = \frac{2\pi l}{Nd}, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left[\frac{N}{2} \right] \end{array} \right.$$

能量方程(2)中, 由于 $|\cos kd| \leq 1$, 能量本征值的取值范围受到限制, 这样便构成了导带中的子带能级结构。加上沿 z 方向的电场后, 与子带跃迁有关的导带势能函数发生倾斜, 这样就使子带能级发生位移, 子带跃迁频率也随之改变。考虑到 MQW 势函数不同周期间的耦合作用很弱, 在加电场情形, 计算时我们采用无限深势阱等效法, 即将阱宽为 a 、垒高为 V_0 的实际阱等效成阱宽为 a' 的无限深势阱。 a' 的选取遵循这样的原则: 它使未加电场时由无限深势阱算出的基态能量与由周期性方阱算出的基态能量相等。

设电场 $F = F\hat{e}_z$, 导带中电子载流子的电量 $q = -e$, 则等效势函数为

$$V = \begin{cases} \infty & \text{当 } z < 0, z > a' \\ eFz & \text{当 } 0 \leq z \leq a'. \end{cases} \quad (4)$$

运动方程满足

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{d^2}{dz^2} + eFz \right) \varphi(z) = E\varphi(z), 0 \leq z \leq a' \quad (5)$$

代入边条件

$$\varphi(z=0) = \varphi(z=a') = 0,$$

可以解得:

本征能量方程

$$A_i(\eta_1)B_i(\eta_2) - A_i(\eta_2)B_i(\eta_1) = 0. \quad (6)$$

波函数

$$\varphi = \begin{cases} 0 & z < 0, z > a' \\ \varphi_0 \left[A_i(\xi) - \frac{A_i(\eta_1)}{B_i(\eta_1)} B_i(\xi) \right] & 0 \leq z \leq a', \end{cases} \quad (7)$$

其中

$$\eta_1 = \left(-\frac{E}{eF} \right) (2m_1eF/\hbar^2)^{1/3}$$

$$\eta_2 = \left(a' - \frac{E}{eF} \right) (2m_1 eF / \hbar^2)^{1/3}$$

$$\xi = \left(z - \frac{E}{eF} \right) (2m_1 eF / \hbar^2)^{1/3},$$

$A_i(\xi)$ 、 $B_i(\xi)$ 是 Airy 函数, φ_0 是归一化常数。

上面解出的能量方程(2)和(6)都不是简单方程, 由它们求本征能量必须借助于数值计算。作者经过比较, 在数值计算中采用了如下的参数关系

$$\begin{cases} V_0 = f\Delta G \\ f = 0.6 \\ \Delta G = 1.266x + 0.26x^2 \\ \alpha = \frac{m_1}{m_2} = \frac{0.0665}{0.0665 + 0.0835x}, \end{cases} \quad (8)$$

其中 x 是 Al 组分。

由于计算中所选用的参数组合情况很多, 这里我们只给出根据某些或某组参数计算总结所得的结果。这些结果具有一定的普遍性。

图 1(a)、(b) 分别是 $x = 0.30, a = 100 \text{ \AA}, b = 200 \text{ \AA}$ 时基态能量 E_1 、第一激发态能量 E_2 及 Stark 位移 $\Delta\nu$ 与电场强度 F 的关系。图中 E_1^* 和 E_2^* 分别是 $E_1^* = E_{10} -$

$6.6 \times 10^{-4}F^2$ 和 $E_2^* = E_{20} + 1.97 \times 10^{-4}F^2$ 的关系曲线 (E_{10}, E_{20} 分别是 $F = 0$ 时 E_1, E_2 的对应值)。在 F 较小的区域(满足 $eFa' \ll E_1$) E_1, E_2 与 E_1^*, E_2^* 重合得很好, 这说明微扰条件满足时 $\Delta E_1, \Delta E_2 \propto F^2$ 。这与从微扰论的角度得到的结论^[9]是一致的。

图 2 是 $x = 0.25, b = 200 \text{ \AA}, F = 60 \text{ kV/cm}$ 时 E_1, E_2 及 $\Delta\nu$ (意义同图 1) 与阱宽 a (下横坐标, 单位 \AA) 和等效阱宽 a' (上横坐标, 单位 \AA) 的关系。图中 E_{10}, E_{20} 的意义同前, $\Delta\nu' = 7.154 \times 10^{-6}a'^4$ 。在 a' 较小的区域(满足 $eFa' \ll E_1$), $\Delta\nu$ 与 $\Delta\nu'$ 重合得很好, 这与微扰法的结论^[10]也是一致的。

图 3 是 $a = 120 \text{ \AA}, b = 200 \text{ \AA}, F = 60 \text{ kV/cm}$ 时 E_1, E_2 及 $\Delta\nu$ (意义同图 1) 与 Al 组分 x 的关系。我们看到, 在阱宽及垒宽较大的情形, 垒高对能级位移量的影响不显著。随着垒高的增加, $|\Delta E_1|, |\Delta E_2|$ 及 $\Delta\nu$ 均有少量减小。

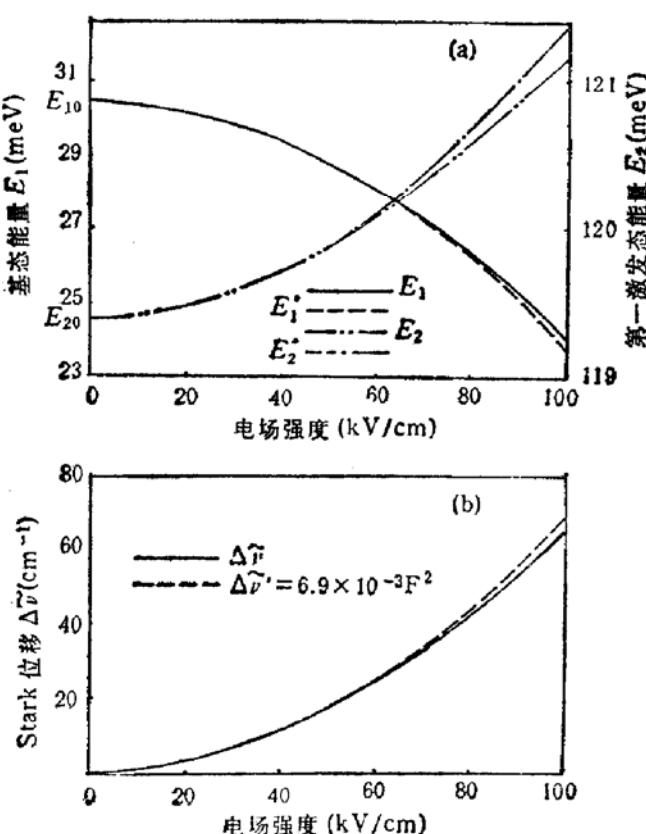


图 1

综上所述, 我们得到如下结论: 阵越宽、垒越低、电场越强, 则 Stark 位移量越大。上

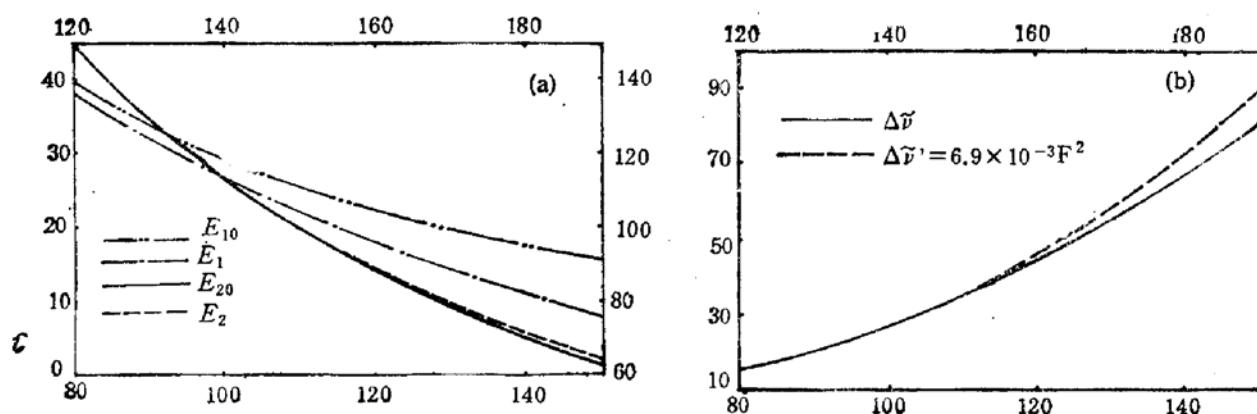


图 2

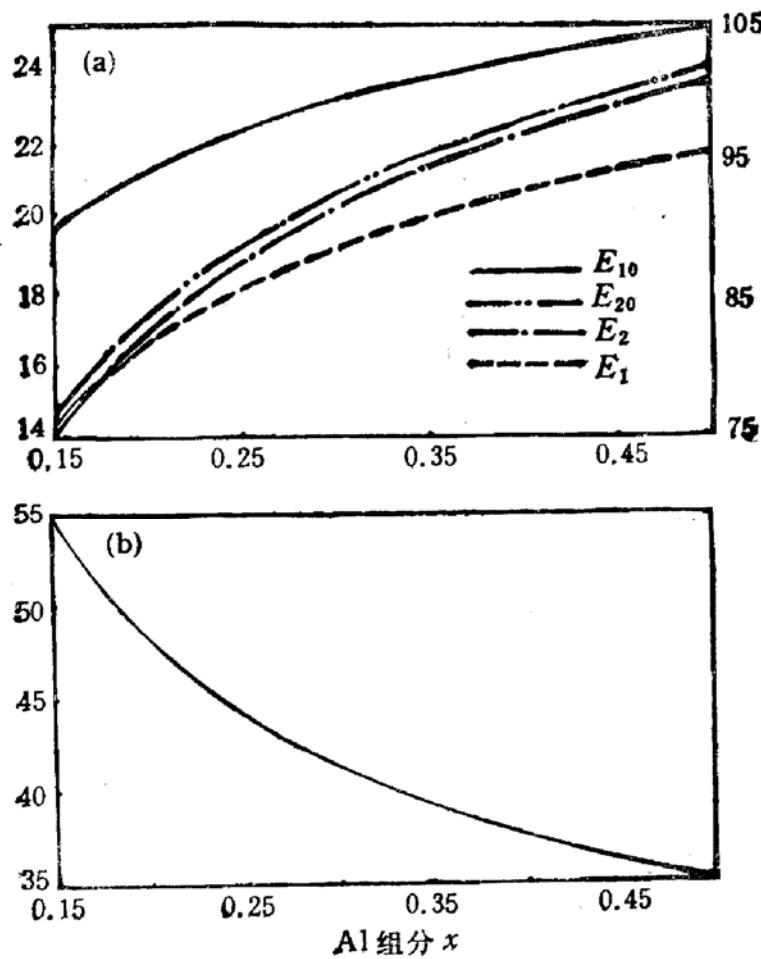


图 3

面根据计算结果所做的分析与 Alex Harwit 和 Bastard 等人用连续阶梯阱近似法^[6]和变分法^[7]所得结果是一致的。表 1 给出了本文部分计算结果与相应实验结果的比较。表中数据的最大相对偏差为 10.4%。这些比较表明, 本文模型虽然简单, 但所得结果与其它方法及实验结果都是符合得很好的。这说明本文所做的近似是有效的。

表 1 部分结构参量下理论值与实验值的比较

结 构 参 量			跃 迁 波 数			实验数据来源
x	$a(\text{\AA})$	$b(\text{\AA})$	$\tilde{\nu}_{\text{理}}$	$\tilde{\nu}_{\text{实}}$	$(\tilde{\nu}_{\text{理}} - \tilde{\nu}_{\text{实}})/\tilde{\nu}_{\text{理}}$	
0.24	65	300	1048	1000	4.8%	文献[11]
0.30	75	100	1032	1003	2.9%	本实验室样品
0.30	80	300	958	925	3.4%	本实验室样品
0.50	100	350	806	900	10.4%	文献[3]

3 GaAs/AlGaAs 方阱子带吸收 Stark 位移的实验研究及结果分析

我们根据本文理论计算设计了两个方阱样品，并对其子带吸收及 Stark 位移进行了观测。图 4 是样品 I 的结构。与该样品对应的结构参数为 $x = 0.30$, $\sigma = 90 \text{ \AA}$, $b = 250 \text{ \AA}$ 。计算表明，这时阱中只含两个子带，吸收峰位于 827 cm^{-1} 。这里我们采用的是垒掺杂，目的在于避免阱掺杂中自由电子对外界电场所起的较强的屏蔽作用。这是观察方阱 Stark 效应的典型结构。

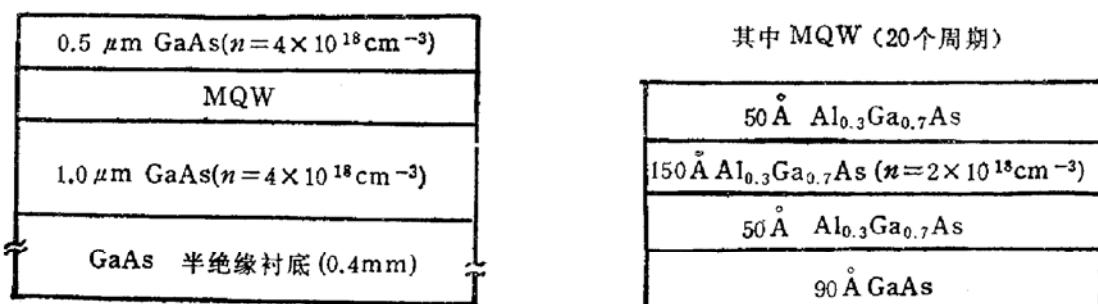


图 4 样品 I 的结构

表 2 样品 I 的实验结果

温度 $T(\text{K})$	电压 $V(\text{V})$	电场强度 $F(\text{kV/cm})$	峰值位置 $\tilde{\nu}_0(\text{cm}^{-1})$	Stark 位移 $\Delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$	半 宽 度 $\delta\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$	吸光度 A	吸收系数 $\alpha(\text{cm}^{-1})$
80	0	0	1055.6	0	264.2	0.0266	1478
80	1.98	29	1059.0	3.4	273.4	0.0256	1422
80	-1.98	-29	1061.5	5.9	274.5	0.0254	1411
80	2.76	41	1071.5	15.9	276.3	0.0250	1388
80	-2.76	-41	1073.0	17.4	276.5	0.0248	1377
300	0	0	1052.4	--	285.7	0.0207	1150

在温度为 80K 及布鲁斯特角入射条件下，我们对样品 I 的子带吸收进行了 $F = 0, 29, -29, 41, -41 \text{ kV/cm}$ 五个点的测试。图 5(a)–(e) 是不同电场下所观测到的吸收曲线。为了抑制噪音，我们用光谱仪上的联机系统对原始光谱图进行了平滑处理。表 2 列出了该样品的实验结果。为便于比较，表 2 还同时给出了我们计算的样品 I 的 Stark 位移的理论值。

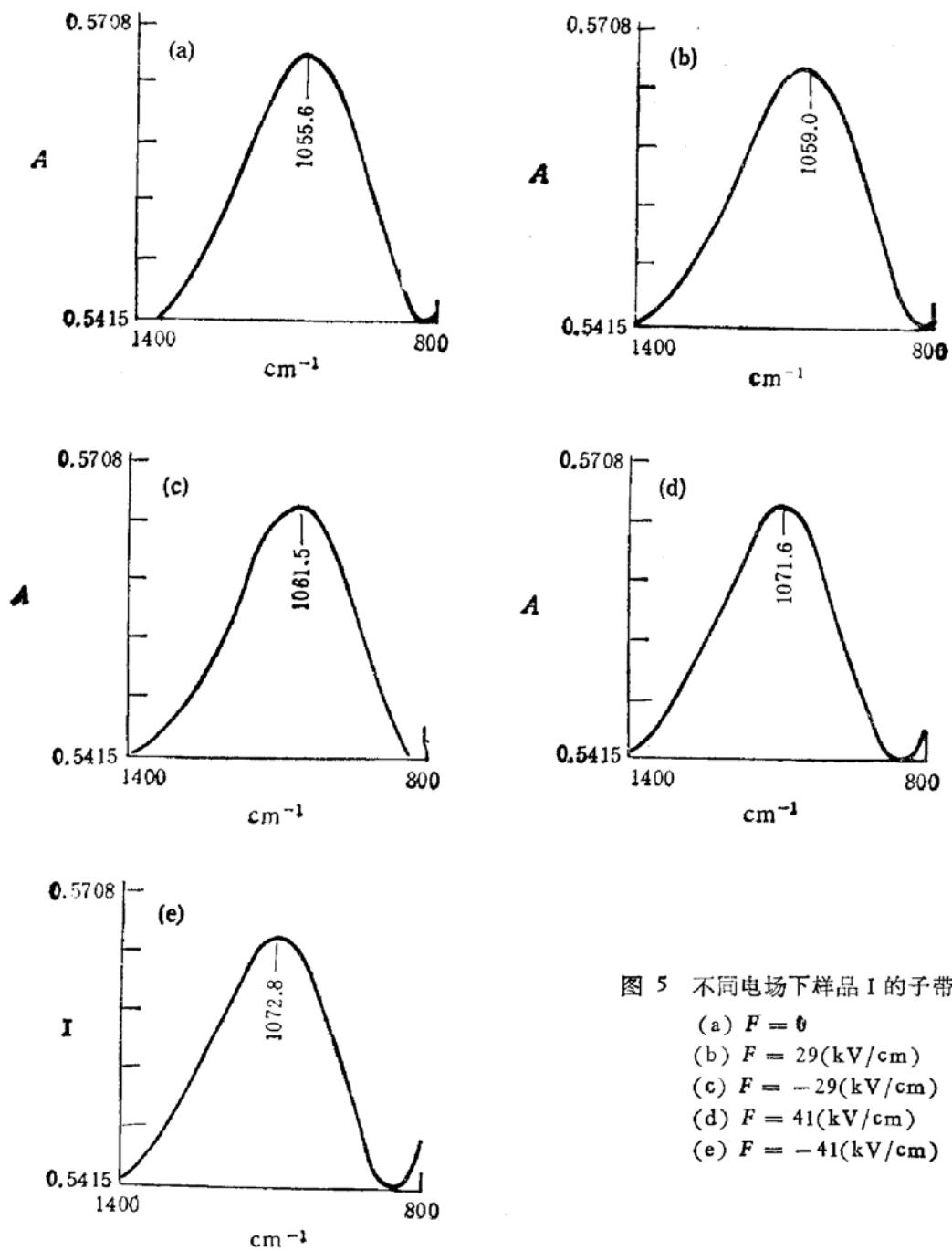


图 5 不同电场下样品 I 的子带吸收谱

- (a) $F = 0$
- (b) $F = 29(\text{kV}/\text{cm})$
- (c) $F = -29(\text{kV}/\text{cm})$
- (d) $F = 41(\text{kV}/\text{cm})$
- (e) $F = -41(\text{kV}/\text{cm})$

从表 2 中我们看到, 随着电场的增大, 子带吸收峰蓝移, 这正是 Stark 效应的体现。定性看, 这与我们在第 2 节的理论分析是一致的。但在定量上, 实验观测到的未加电场时样品子带吸收的中心频率及 Stark 位移量均比理论值要大, 而且实验观测到电场反向时样品的 Stark 位移量会发生变化。这与理想方阱的理论分析是不一致的。对于理论和实验的这些差异, 我们认为主要是由于两个原因: 其一, 样品衬底的质量不佳及样品生长中参量控制的飘移性导致了样品的不均匀性及 z 方向上势阱的非对称性; 其二, 样品掺杂浓度较高, 引起了不可忽略的能带修正, 理想方阱模型忽略了这一点。

从表 2 中我们还看到, 当温度由 300K 降到 80K 时, 吸收峰蓝移了 4.2cm^{-1} 。吸收峰的这一蓝移现象是一个普遍现象, 它是势垒高度随温度降低而上升的反映。根据文献 [12], GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 的垒高随温度的变化关系为 $\frac{dV_0}{dT} \cong -1.9 \times 10^{-2}\text{meV}/\text{K}$ 。因此

$\Delta V_0 = V_0(80\text{K}) - V_0(300\text{K}) \cong 4.2\text{meV}$. 用第 2 节的方法计算, 可得此时样品 I 吸收峰的蓝移为 5.6cm^{-1} . 这与前面的实验结果是基本一致的.

表 2 的数据显示, 随着电场的增强, 吸收线宽增大, 峰值吸收函数减小. Doyeol Ahn 等人曾利用密度矩阵对量子阱的吸收系数进行了理论分析^[13], 结论是 GaAs/AlGaAs 方阱双能级系统的峰值线性吸收系数 α_{\max} 主要依赖于两能级间的跃迁矩阵元 $|M_{21}|$ 及两能态的弛豫时间 τ (设二能级的弛豫时间相同): $\alpha_{\max} \propto |M_{21}|^2 \tau$; 吸收线宽由弛豫时间决定: $\delta\nu \propto \frac{1}{\tau}$. 与此相比较, 我们可以推断, 电场增大, 将导致弛豫时间缩短. 对此我们可以作这样的理解: 电场增大, 隧穿效应增强, 致使子带能级加宽; 另外电场增大, 电子-电子、电子-声子散射以及杂质散射作用加强, 这些都是导致弛豫时间缩短的可能原因. 此外按照 Doyeol Ahn 等人的计算, $|M_{21}|$ 随电场的增大而减小, 因此实验观测到峰值吸光度随电场的增大而减小与上述分析是一致的.

4 结语

子带间光跃迁的 Stark 位移是研制光调制器的基础效应, 同时此效应存在于基于该类跃迁的各种光电器件中, 直接影响器件的光电特性, 因此对该效应的研究是很重要的. 本文从理论和实验上探讨了 GaAs/AlGaAs 方阱的子带吸收及其 Stark 效应. 由于方阱的对称性, 弱电场下子带能级的一级微扰为零, 所以方阱的子带跃迁的 Stark 效应只有在强电场中才显著. 本文的理论分析和实验结果都说明了这一点. 但施加强电场所引起的大的漏电流和热效应不仅会降低信噪比, 而且可能会导致样品的击穿. 因此方势阱的子带吸收 Stark 效应在应用上受到一定局限. 不过对于那些不希望因外加偏压而改变中心工作波长的器件, 方势阱结构则具有优势.

近年来已有一些作者对非对称阱的 Stark 位移进行了一些研究. 非对称阱由于其结构的非对称性, 容易获得较大的 Stark 位移, 而且其 Stark 位移随外加电场极性的变化可以出现蓝移也可以出现红移. 因此比较起来非对称阱(如阶梯阱)是更有应用前景的一种量子阱结构.

致 谢 作者感谢中国科学院物理研究所潘少华教授对本文理论工作所做的有益讨论, 感谢物理所分子束外延研究组提供了研究样品.

参 考 文 献

- [1] Pinczuk *et al.*, Solid State Commun., 1979, 32:1001.
- [2] West L. C. Appl. Phys. Lett., 1985, 46:1156.
- [3] Alex Harwit, Appl. Phys. Lett., 1987, 50:685.
- [4] D. Ahn *et al.*, Phys. Rev., 1987, B35:4149.
- [5] Yuen S. Y. Appl. Phys. Lett., 1983, 43:813.
- [6] Alex Harwit, J. Appl. Phys., 1986, 60:3211.
- [7] Bastard G, Phys. Rev., 1983, E28:324.
- [8] Kittel C, Introduction to Solid State Phys., 5th ed.. Wiley, 1976.

- [9] 曾谨言,量子力学,北京:科学出版社,1982.
- [10] F. M. Fernandez, Physica (Utrecht), 1982, 11A:334.
- [11] M. J. Kane, Semicond. Sci. Technol., 1988, 3:722.
- [12] G. Hasnain, J. Appl. Phys., 1990, 67:4361.
- [13] Doyeol Ahn, IEEE J. Quantum Electronics, 1987, QE-23:2196.

Theoretical and Experimental Research on the Intersubband Absorption and its Stark Shifts of GaAs/AlGaAs MQW

Wu Yun Chen Zhenghao

(Institute of Physics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Liu Shengmao

(Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084)

Abstract The eigen-energies and their stark shifts of GaAs/AlGaAs single quantum well structures were calculated theoretically and studied experimentally. The calculation was based on Kronig-Penney model and the infinite-well approximation, and comparison was made between the results in this paper and those from other methods. The experimental results were analysed.

PACC: 6865, 7155, 7820J, 7280E