

应变层 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 量子阱的光调制反射谱研究

潘士宏 刘毅 张存洲 张光寅

(半导体超晶格国家重点实验室,南开大学物理系,天津, 300071)

冯巍 周钩铭

(中国科学院物理研究所,北京, 100080)

1991 年 3 月 11 日收到, 1991 年 5 月 10 日修改定稿.

用光调制反射谱 (PR) 测量了三块应变层 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 量子阱多重结构样品, 每块样品中包含宽度为 140、80、50、30 和 20 Å 的量子阱。在 300K 和 77K 的 PR 谱中观察到各个量子阱的 11H 和 11L 光跃迁。根据 PR 数据用包络函数法进行分析, 估算了量子阱中 In 的成分。在解释 300K 和 77K 实验结果时考虑了流体静压形变势常数的温度依赖性。实验和理论最佳符合时求得导带边不连续性在 300K 为 0.7, 77K 为 0.66。

PACC: 7340L, 7865

一、引言

近年来关于 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 应变层超晶格 (SLS) 和量子阱的研究格外受到重视, 一方面是由于它在光电子器件应用方面的优良性质, 另一方面它也可作为研究 SLS 物理的一种典型。自 Marzin 等^[1]的工作开始, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ SLS 的光谱特性得到了广泛的研究^[2-7]。主要涉及带边不连续性, 子带色散, 激子等一些物理问题。文献[4]用光调制反射谱 (PR) 研究了窄阱 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ SLS, 得到带边不连续性和子带色散等一些重要信息。本文将报道用 PR 和光荧光谱 (PL) 研究一组具有宽度不同的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 多量子阱试样的结果。着重研究了用光谱数据估算量子阱中 In 的成份问题, 在解释 300K 和 77K 的实验结果时考虑了流体静压形变势常数的温度依赖性, 对带边不连续性也作了较详细的讨论。

二、实验方法

样品是在半绝缘 GaAs (100) 衬底上用分子束外延的方法生长的。先在衬底上生长约 1 μm GaAs 缓冲层。然后依次生长宽度为 140、80、50、30 和 20 Å 的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 量子阱, In 的名义成分控制在 $x = 0.12$ 。阱间生长 200 Å GaAs 的势垒层。顶端生长 500 Å 的 GaAs 保护层。整个多量子阱结构都是未掺杂的。三块样品具有相同的结构,

但生长时衬底温度不同: R101 为 560°C, R102 为 480°C, R103 为 500°C。

PR 测量以 250 W 碘钨灯作为光源, 用北京第二光学仪器厂的 WDG-500 单色仪。20mW 的 He-Ne 激光经斩波后直接照射到样品上作为调制光, 必要时加以衰减。用硅光电探测器测量反射光, 反射率调制信号 dR/R 由 EG&G 5208 锁相放大器检测。数据由 PC-AT 微机采集。

三、计算和分析方法

下面列出我们计算中采用的重要公式和参数。

样品中各 $In_xGa_{1-x}As$ 层的厚度均小于临界厚度, 并且其总厚度远小于 GaAs 缓冲层厚度。所以在垂直于生长方向的平面上, $In_xGa_{1-x}As$ 层以 GaAs 的晶格常数 a_2 生长。在 $In_xGa_{1-x}As$ 层中存在双轴应变

$$\varepsilon = (a_2 - a_1)/a_1, \quad (1)$$

a_1 为 $In_xGa_{1-x}As$ 无应变时的晶格常数, 由 GaAs 和 InAs 的晶格常数用内插方法计算。

应变后 $In_xGa_{1-x}As$ 层中价带顶的重空穴和轻空穴带发生分裂, 重轻空穴的能隙分别为

$$E_{g^+} = E_0(In_xGa_{1-x}As) + \delta E_H + \delta E_s, \quad (2)$$

$$E_{g^-} = E_0(In_xGa_{1-x}As) + \delta E_H + \frac{1}{2}(\Delta - \delta E_s) \quad (3)$$

$$-\frac{1}{2} [\Delta^2 + 2\Delta\delta E_s + 9(\delta E_s)^2]^{1/2} \quad (3)$$

其中无应变 $In_xGa_{1-x}As$ 的能隙 $E_0(In_xGa_{1-x}As)$ 由下列经验公式确定:

300K 时^[8]

$$E_0(In_xGa_{1-x}As) = E_0(GaAs) - 1.53x + 0.45x^2. \quad (4)$$

77K 时^[9]

$$E_0(In_xGa_{1-x}As) = E_0(GaAs) - 1.47x + 0.375x^2. \quad (5)$$

GaAs 的能隙 $E_0(GaAs)$ 在 300K 和 77K 时分别为 1.424 和 1.508 eV。流体静压力引起能隙的变化 δE_H 和单轴应力引起轻重空穴的分裂 δE_s 分别为

$$\delta E_H = 2a[(c_{11} - c_{12})/c_{11}]\varepsilon, \quad (6)$$

$$\delta E_s = -b[(c_{11} + 2c_{12})/c_{11}]\varepsilon. \quad (7)$$

其中 a 和 b 是相应的形变势常数, c_{ij} 是 $In_xGa_{1-x}As$ 的弹性常数。这些参数的数值都用内插方法由 GaAs 和 InAs 的相应参数的数值求得。 Δ 是 $In_xGa_{1-x}As$ 的自旋轨道分裂, 由经验公式求出^[4]

$$\Delta = 0.341 - 0.09x + 0.14x^2. \quad (8)$$

计算中采用的参数数值列于表 1。

量子阱能级的计算用 Kane 三带模型的包络函数法, 文献 [12] 中已有详细报道。 $In_xGa_{1-x}As$ 中电子和轻重空穴的有效质量由下列公式计算^[11]:

表 1

材料	晶格常数(Å)	^a (eV)	^b (eV)	^{c₁₁} (10 ¹¹ dyn/cm ²)	^{c₁₂} (10 ¹¹ dyn/cm ²)
GaAs	5.6533 ^a	-9.8 ^b	-1.76 ^b	11.88 ^a	5.32 ^a
InAs	6.0584 ^c	-5.8 ^b	-1.8 ^b	8.33 ^c	4.53 ^c

^a 参考文献[8], ^b 参考文献[10], ^c 参考文献[11].

$$m_e^* = (0.0665 - 0.044x)m_0, \quad (9a)$$

$$m_{lh}^* = (0.094 - 0.062x)m_0, \quad (9b)$$

$$m_{hh}^* = (0.34 - 0.07x)m_0. \quad (9c)$$

PR 实验数据的分析用计算机拟合的方法进行。根据文献[13]，量子阱中激子吸收的 PR 线形为介电函数的一阶微商，在较高温度下为高斯线形。本文 300 K 和 77K PR 数据的拟合均用高斯线形。

四、实验结果和讨论

图 1 和图 2 分别是样品 R102 在 300K 和 77K 的 PR 谱。样品 R101 和 R103 有类似的 PR 谱。用 A、B、C、D、E 分别表示 140、80、50、30、和 20 Å 的量子阱，用 mnH (mnL) 表示第 m 个电子能级与第 n 个重(轻)空穴能级之间的跃迁。图中点线为实验结果，实线为拟合曲线。用包络函数法的计算结果和谱线的拟合参数相对照，容易识别各个谱峰对应的跃迁性质。图中标明了全部量子阱的 11H 跃迁和多数阱的 11L 跃迁。

带边不连续性是一个重要参数。导带边不连续性定义为 $Q_c = \Delta E_e / \Delta E_h$ 。 ΔE_e 是界面 GaAs 导带底能量与 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 应变层导带底能量之差。 $\Delta E_h = E_h(\text{GaAs}) - E_{gh}$ 。当 Q_c 大于特定值 Q_{co} 时 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的轻空穴带边能量将小于 GaAs 价带边能量，轻空穴将束缚在 GaAs 层内，成为第二类界面。此时对我们的多量子阱结构试样其能带结构示意于图 3。图中虚线表示 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 轻空穴带边。轻空穴处于阱宽为 200 Å，垒宽分别为 140、80、50、30 和 20 Å 的多重量子阱中。这使轻空穴能级的计算变得复杂。为简单起见，我们用阱宽为 200 Å 的超晶格来作近似计算。当超晶格的垒宽从 140 Å 变至 20 Å 时，第一轻空穴能级的变化小于 3 meV。由此引起跃迁能量 $E(11L)$ 的计算误差大略与此相同。在 In 成分为 0.1 至 0.14 范围内 $Q_{co} \approx 0.56$ 。下文将说明由我们的实验中求出的 Q_c 近似为 0.7，对电子和轻空穴来说属于第二类界面。

In 成分 x 和阱宽的真实数值与样品生长时给出的名义值有一定程度的偏离。对于单个量子阱目前尚无可靠方法测定 In 成分。拟合光跃迁能量的实验值和理论值有可能确定 In 成分。实际上宽量子阱的跃迁能量 $E(11H)$ 对阱宽和 Q_c 的适度变化不很敏感，而对 x 的变化十分敏感。设定 Q_c ，拟合 $E(11H)$ 的实验值和计算值，可以求出 x 的初步近似值。另一方面，跃迁能量 $E(11L)$ 对 Q_c 相对敏感，调节 Q_c 使 $E(11L)$ 的计算值与实验值尽量一致。对单个量子阱反复进行上述计算，总可以使实验和理论趋于一致，同时求得 x 和 Q_c 。一般认为，在 x 的一定范围内 Q_c 是常数。所以由不同样品和不

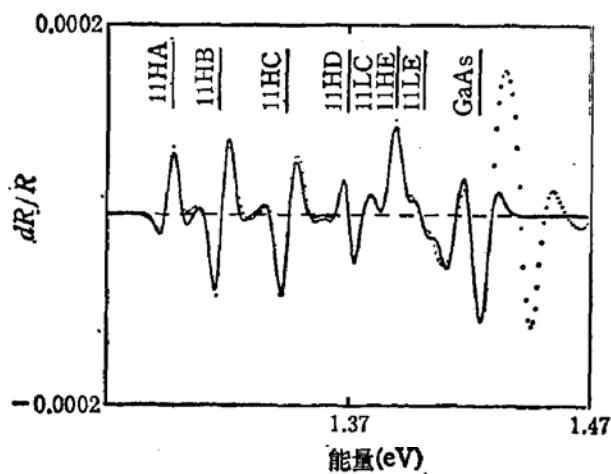


图1 样品R102 300K PR 谱

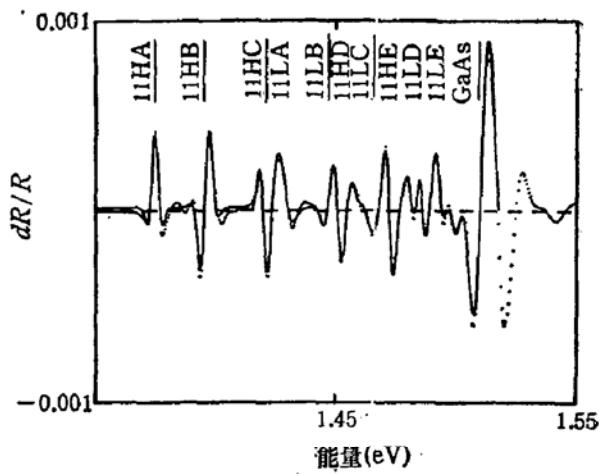


图2 样品 R102 77K PR 谱

同宽度量子阱求出的 Q 都应相同。计算结果对样品 R101、R102 和 R103 分别列表于表 2、3 和 4 中。以下分别 300K 和 77K 的结果进行分析讨论。

(1) 300K 的结果

一般认为 300K 量子阱的光吸收仍是激子吸收。因此 $E(11H)$ 的 PR 实验值应比理论计算的带间跃迁能量低一个激子束缚能。根据新近发表的数值^[15]，对 140、80、50 和 30 Å 阵我们采用激子束缚能为 8 meV，对 20 Å 阵采用 6 meV。对第二类界面轻空穴和电子分别束缚于不同

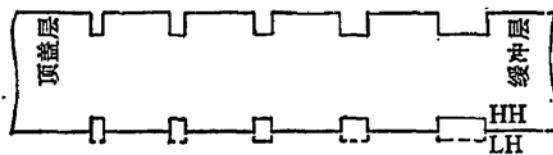


图3 能带结构示意图

束缚能为 8 meV，对 20 Å 阵采用 6 meV。对第二类界面轻空穴和电子分别束缚于不同

表2 样品 R101 数据

	A	B	C	D	E
L(Cal.) (Å)	140	80	50	30	20
X(Cal.)	0.13	0.13	0.118	0.114	0.11
300K E(11H)					
Theo. (meV)	1313	1336	1368	1393	1406
Exp. (PR)	1305	1328	1360	1384	1402
300K E(11L)					
Theo. (meV)	1354	1370	1392	1407	1415
Exp. (PR)	—	1366	1391	1407	1418
77K E(11H)					
Theo. (meV)	1393	1414	1447	1474	1488
Exp. (PL)	1383	1408	1440	1468	1486
Exp. (PR)	1384	1409	1443	1469	1483
77K E(11L)					
Theo. (meV)	1439	1454	1476	1491	1499
Exp. (PR)	—	—	1476	1490	1501

Theo. (300K) $a = -9.8 \text{ eV}$, $Q = 0.7$.

Theo. (77K) $a = -8.4 \text{ eV}$, $Q = 0.66$.

表3 样品 R102 数据

	A	B	C	D	E
L(Cal.) (Å)	143	83	50	31	21
X(Cal.)	0.14	0.14	0.14	0.14	0.14
300K E(11H)					
Theo. (meV)	1304	1325	1353	1380	1397
Exp. (PR)	1296	1317	1345	1371	1391
300K E(11L)					
Theo. (meV)	1347	1363	1382	1400	1414
Exp. (PR)	—	—	1380	1401	1411
77K E(11H)					
Theo. (meV)	1382	1403	1431	1459	1478
Exp. (PL)	1375	1395	1422	1452	1472
Exp. (PR)	1375	1396	1422	1453	1472
77K E(11L)					
Theo. (meV)	1432	1447	1466	1484	1494
Exp. (PR)	1428	1448	1467	1485	1498

Theo. (300K) $a = -9.8\text{eV}$, $Q = 0.7$.Theo. (77K) $a = -8.4\text{eV}$, $Q = 0.66$

表4 样品 103 数据

	A	B	C	D	E
L(Cal.) (Å)	140	82	50	30	21
X(Cal.)	0.14	0.14	0.14	0.14	0.14
300K E(11H)					
Theo. (meV)	1305	1326	1353	1381	1397
Exp. (PR)	1297	1319	1345	1373	1390
300K E(11L)					
Theo. (meV)	1348	1363	1382	1401	1410
Exp. (PR)	—	1355	—	1403	1411
77K E(11H)					
Theo. (meV)	1383	1404	1431	1461	1478
Exp. (PL)	—	1394	1421	1452	1472
Exp. (PR)	1375	1397	1423	1455	1478
77K E(11L)					
Theo. (meV)	1432	1448	1466	1485	1494
Exp. (PR)	1432	1450	1467	1487	1496

Theo. (300K) $a = -9.8\text{eV}$, $Q = 0.7$.Theo. (77K) $a = -8.4\text{eV}$, $Q = 0.66$.

层内，激子束缚能变得很小，予以忽略。表中所列跃迁能量的理论值都是带间跃迁能量。表中 $x(\text{Cal.})$ 是 In 成分的计算值。样品 R102 和 R103 中各阱的成分相当一致，近似为 0.14。计算中同时对阱宽作了适当的调整，列于表中 L(Cal.)。样品 R101 中各阱的

成分则有较大的起伏,从 0.11 变到 0.13。计算中采用 GaAs 流体静压形变势常数 $a = -9.8 \text{ eV}$, 求得导带边不连续性的最佳值为 $Q_c = 0.7$ 。由表中数据看出理论和实验符合得相当好。

用这种方法同时确定 x 和 Q_c 受到许多因素的影响,其中最重要的是经验公式(4)和(5),以及形变势常数的数值。前者决定无应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的能隙,后者决定应变引起的能隙变化,二者共同决定应变后能隙 E_{gh} 和 E_{gl} 。以下只讨论 GeAs 流体静压形变势常数 a 。关于它的数值目前文献上存在较大的分歧。选用的数值有 $-9.8^{[4,15]}$, $-8.68^{[2,5,6]}$, $-8.4^{[1,3]}$, $-7.1^{[7]} \text{ eV}$ 等。选用不同数值对理论计算结果有很大影响。例如,用 $a = -8.68 \text{ eV}$ 同样可以使理论和实验符合,只要把表 2—4 中的成分 $x(\text{Cal.})$ 调小 0.01 左右,求得的 Q_c 仍为 0.7。

(2) 77K 的结果

根据 300K 求得的实验值;由公式(5)确定 77K 无应变 $\text{In}_x\text{Ge}_{1-x}\text{As}$ 的能隙,仍用 $a = -9.8 \text{ eV}$ 和 $Q_c = 0.7$ 进行计算,得到的 $E(11H)$ 的数值比相应的实验值高约 20 meV。减去激子束缚能后 $E(11H)$ 的实验值相对于理论值都向低能方向偏移约 12 meV。从表 2—4 中可以看出 77K $E(11H)$ 的 PR 和 PL 的实验值符合得很好。在 PL 实验中样品浸泡在液氮中,因此 $E(11H)$ 的偏移不是由于温度测量误差造成的。

如果认为 300K 观察到的 PR 谱属于带间跃迁,而 77K PR 谱属于激子跃迁,那么 $E(11H)$ 在 77K 实验值和计算值之差正好是激子的束缚能。这样得出的激子束缚能约 12 meV,比文献[15]的测量值 8 meV 高。前面已经指出,300K PR 谱很可能仍属于激子跃迁,这就需要进一步探讨引起 77K $E(11H)$ 偏移的原因。

我们认为 $E(11H)$ 的偏移很可能是由于经验公式(4)和(5)的误差,以及计算中忽略了形变势常数的温度依赖性,使 E_{gh} 的计算值和实际值不符造成的。形式上修改经验公式(5)或调整形变势常数 a 都可以使理论计算和实验符合。下面讨论形变势常数 a 的选取。表 2—4 中 77K $E(11H)$ 和 $E(11L)$ 的理论值是用 GaAs 形变势常数 $a = -8.4 \text{ eV}$ 和 $Q_c = 0.66$ 计算的。实验值和理论值符合得很好。这个结果说明 300K 和 77K 需要用不同的形变势常数 a 。这方面的进一步研究无疑是必要的。

关于 GaAs 流体静压形变势常数 a ,文献[10]中收集的数据 $a = -9.8$ 和 -8.68 eV 都是在 300K 的测量值。在研究 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ SLS 低温下光学性质的文献中曾多次被引用,而不管温度依赖性。目前尚缺乏低温下 a 的可靠数值,文献[10]中 a 的一个 120K 的测量值为 -6.7 eV ,似乎与 300K 的数值相差大远而无人引用。根据文献[16]未发表的数据,77K GaAs 的 a 值约为 -8.0 eV ,与我们采用的 -8.4 eV 比较接近。

综上所述,我们用 PR 研究了具有多个宽度不同量子阱的应变层 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 试样。在 300K 和 77K 观察到各个量子阱的 11H 跃迁和大多数量子阱的 11L 跃迁。用弹性理论和包络函数法对 PR 实验数据进行分析,估算了各个量子阱中 In 的成分。并发现要使 300K 和 77K 的实验数据都和理论计算相符合,就必须考虑流体静压形变势的温度依赖性。由实验和理论的最佳拟合,求得导带边不连续性在 300K 时为 $Q_c = 0.7$,在 77K 时为 $Q_c = 0.66$ 。这个结果与文献[1—7]基本一致,而与文献[14]矛盾。Menéndez 等在[14]中报道用光散射方法求得 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 的导带边不连续性 $Q_c =$

0.4, 重、轻空穴都束缚于 $In_xGa_{1-x}As$ 层内。根据我们的结果, 轻空穴束缚于 GaAs 层内, 形成第二类界面。电子和空穴在空间上的分离使激子束缚能变得很小而极易分解, 同时使 140 和 80 \AA 阵的 11L 跃迁变得很弱, 而 30 和 20 \AA 阵的 11L 跃迁却相当强。

参 考 文 献

- [1] J.-Y. Marzin, M. N. Charasse, B. Sermage, *Phys. Rev.*, **B31**, 8298(1985).
- [2] G. Ji, D. Huang, U. K. Reddy, T. S. Henderson, R. Houdre, and H. Morkoc, *J. Appl. Phys.*, **62**(8), 3366(1987).
- [3] T. G. Andersson, Z. G. Chen, V. D. Kulakovskii, A. Uddin, and J. T. Vallin *Phys. Rev.*, **B37**, 4032(1988).
- [4] S. H. Pan, H. Shen, Z. Hang, F. H. Pollak, W. Zhuang, Q. Xu, A. P. Roth, R. A. Masut, C. Lacelle, and D. Morris, *Phys. Rev.*, **B38**, 3375(1988).
- [5] D. Gershoni, J. M. Vanderberg, S. N. G. Chu, H. Temkin, T. Tanbun-Ek and R. A. Logan, *Phys. Rev.*, **B40**, 10017(1989); D. Gershoni, H. Temkin, M. B. Panish, and R. A. Hamm, *Phys. Rev.*, **B39**, 5531(1989).
- [6] J.-P. Reithmaier, R. Hoger, H. Riechert, A. Heberle, G. Abstreiter, and G. Weimann, *Appl. Phys. Lett.*, **56**(6), 536(1990).
- [7] K. J. Moore, G. Duggan, A. Raukema, and K. Woodbridge, *Phys. Rev.*, **B42**, 1326(1990).
- [8] S. Adachi, *J. Appl. Phys.*, **58**, R1(1985).
- [9] Y. L. Leu, F. A. Thiel, H. Scheiber, B. I. Miller, and J. Backmann, *J. Electron. Mater.*, **8**, 663(1979).
- [10] Landolt-Bornstein, New Series, Group 111 (Springer, Berlin, 1982), Vol. 17a.
- [11] S. Adachi, *J. Appl. Phys.*, **53**, 8775(1982).
- [12] G. Bastard and J. A. Brum, *IEEE J. Quant. Electron.*, **QE-22**, 1625(1986).
- [13] H. Shen, S. H. Pan, F. H. Pollak, M. Dutta, and T. R. AuCoin, *Phys. Rev.*, **B36**, 9384(1987).
- [14] J. Menendez, A. Pincsuk, D. J. Werder, S. K. Sputz, R. C. Miller, D. L. Sivco and A. Y. Cho, *Phys. Rev.*, **B36**, 8165(1987).
- [15] H. Q. Hou, Y. Segawa, Y. Aoyagi, S. Namba, and J. M. Zhou, *Phys. Rev.*, **B42**, 1284(1990).
- [16] 中国科学院物理所未发表的测量值。

Photoreflectance Study of Strained-Layer $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ Quantum-Well

Pan Shihong, Liu Yi, Zhang Cunzhou, Zhang Guangyin

(National Laboratory of Semiconductor Superlattices, and Department of Physics, Nankai University, Tianjin, 310071)

Feng Wei and Zhou Junming

(Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080)

Abstract

Photoreflectance (PR) measurements have been performed on three strained-layer $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ quantum-well (QW) multiple structure samples, each of which contains QWs of 140, 80, 50, 30 and 20 Å in widths. Optical transitions of 11H and 11L corresponding to each of the QWs have been observed in the PR spectra at the temperatures of 300K and 77K. The PR data have been analysed with the envelopefunction method, and the In compositions in the QWs have been estimated. The temperature dependence of the hydrostatic deformation potential constant has been considered in the explanation of the PR data at 300K and 77K. The best agreement between experiments and theoretical calculations is found with conduction band-offsets 0.7 at 300K and 0.66 at 77K.

PACC: 7340L, 7865.