

电场下超晶格 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ [111] 的电子结构

范卫军 夏建白

(中国科学院半导体研究所, 北京, 100083)

1990年8月15日收到

用有效质量理论研究了 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ [111] 超晶格在外加电场下的电子结构。具体计算了超晶格的子能带色散关系曲线, 子能级随外加电场的变化, 并且计算了 $k_z = 0$ 的光跃迁矩阵元平方随电场的变化。与零电场情况相比, 发现在 $k_z \neq 0$ 处子能带的二重简并解除。随电场的增大, $\Delta n = 0$ 的跃迁减小, 而 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁增大。考虑单轴压力效应后, 轻空穴和重空穴的能级位置发生下降和上升。

一、引言

近几年, 在实验和理论上对 [001] 方向生长的超晶格、量子阱在电场下的性质进行了广泛研究^[1-3]。对其它方向生长的超晶格量子阱的研究报道较少。这是因为制备高质量的 [111] 或 [110] 方向生长的超晶格量子阱比 [001] 方向的要困难。但是最近用 MBE 也制备出了高质量的非 [001] 方向生长的 $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ 量子阱。Wang^[4] 报道了用 MBE 生长的 $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ [11N] ($N = 2, 3, 5, 7, 9$) 的表面结构可以和 $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ [001] 的同样完美。Hayakawa^[5] 用 MBE 制出了 $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ [111] 量子阱, 发现 $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ [111] 量子阱激光器的阈值电流密度比 [001] 的小。他们的实验表明 $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$ [111] 量子阱的光跃迁比 [001] 的增强, 并且 GaAs 的重空穴的有效质量各向异性: $m_{hh}^* [111]/m_{hh}^* [001] = 0.9/0.34 = 2.65$ ^[6]。Shanabrook 的实验表明 $m_{hh}^* [111]/m_{hh}^* [001] = 0.75/0.34 = 2.21$ ^[7]。

在理论上, Maihot^[8] 等人用 $k \cdot p$ 理论计算了 $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{Al}_{1-y}\text{In}_y\text{As}$ 超晶格的电子结构。

最近, 夏建白^[9] 用有效质量理论具体计算了 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ [11N] 超晶格的子能带和光跃迁矩阵元, 并考虑了单轴压力效应。本文将这一理论推广到有电场的情况, 具体计算了超晶格导带价带能级和光跃迁矩阵元平方随电场的变化。

二、计算方法

我们采用 L-K 有效质量近似来描述半导体价带空穴^[10]。其哈密顿量写为

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{m_0} \left\{ \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \frac{k^2}{2} - \gamma_1 (k_1^2 J_1^2 + k_2^2 J_2^2 + k_3^2 J_3^2) - 2\gamma_3 (\{k_1 k_2\} \{J_1 J_2\} \right. \right. \\ \left. \left. + \{k_2 k_3\} \{J_2 J_3\} + \{k_3 k_1\} \{J_3 J_1\}) \right\} \quad (1)$$

式中 $k^2 = k_1^2 + k_2^2$, $\{J_i J_j\} = \frac{1}{2} (J_i J_j + J_j J_i)$, $\{k_i k_j\} = \frac{1}{2} (k_i k_j + k_j k_i)$ ($i, j = 1, 2, 3$), $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 为有效质量参数, m_0 为电子静止质量. 设新坐标系中的三个轴用 x, y, z 表示. x 轴沿 [112] 方向, y 轴沿 [110] 方向, z 轴沿 [111] 方向. 做如下变换:

$$k_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} k_x - \frac{1}{\sqrt{2}} k_y + \frac{1}{\sqrt{3}} k_z \\ k_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} k_x + \frac{1}{\sqrt{2}} k_y + \frac{1}{\sqrt{3}} k_z \quad (2)$$

$$k_3 = -\sqrt{\frac{2}{3}} k_x + \frac{1}{\sqrt{3}} k_z \\ J_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} J_x - \frac{1}{\sqrt{2}} J_y + \frac{1}{\sqrt{3}} J_z \\ J_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} J_x + \frac{1}{\sqrt{2}} J_y + \frac{1}{\sqrt{3}} J_z \quad (3)$$

$$J_3 = -\sqrt{\frac{2}{3}} J_x + \frac{1}{\sqrt{3}} J_z$$

并选取适当的表象

$$J_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$J_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} i & 0 \\ 0 & 0 & i & -\frac{\sqrt{3}}{2} i \\ \frac{\sqrt{3}}{2} i & -i & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} i & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$J_s = \begin{bmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{bmatrix}$$

则在新坐标系中的哈密顿量可表示为 $4N \times 4N$ 矩阵形式

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{m_0} \begin{bmatrix} P_1 & R & Q & 0 \\ R^* & P_2 & 0 & -Q \\ Q^* & 0 & P_2 & R \\ 0 & -Q^* & R^* & P_1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

式中

$$P_1 = \frac{1}{2} (\gamma_1 + \gamma_3) k_{\parallel}^2 + \frac{1}{2} (\gamma_1 - 2\gamma_3) k_z^2$$

$$P_2 = \frac{1}{2} (\gamma_1 - \gamma_3) k_{\parallel}^2 + \frac{1}{2} (\gamma_1 + 2\gamma_3) k_z^2$$

$$R = -\frac{1}{2\sqrt{3}} (\gamma_2 + 2\gamma_3)(k_x - ik_y)^2 - \sqrt{\frac{2}{3}} (\gamma_3 - \gamma_2) k_x (k_x + ik_y)$$

$$Q = -\frac{1}{\sqrt{6}} (\gamma_3 - \gamma_2)(k_x + ik_y)^2 - \frac{1}{\sqrt{3}} (\gamma_3 + 2\gamma_2) k_x (k_x - ik_y)$$

$$k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$$

电场下超晶格的空穴哈密顿量 H 写为

$$H = H_0 + V(z) \quad (5)$$

其中,

$$V(z) = V_0(z) + V_F(z) \quad (6)$$

V_0 为零电场下超晶格的周期势, 见图 1. V_F 为外加电场势。

$$V(z) = \begin{cases} V_1 \pm eF \left[z - k(l+d) - \frac{l+d}{2} \right], & \frac{l}{2} + k(d+l) \leq z \leq \frac{l}{2} + k(d+l) + d. \\ \pm eF[z - k(l+d)], & -\frac{l}{2} + k(d+l) < z < \frac{l}{2} + k(d+l). \end{cases} \quad (7)$$

上式中 F 为电场强度, $\pm e$ 分别代表空穴和电子电荷。 V_1 为势垒高度, k 取零和整数。这里我们假定电场势是一个周期函数。

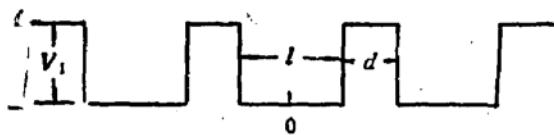
假定空穴的波函数 ψ_h 用平面波做展开

$$\psi_h = e^{i(k_x z + k_y y)} \sum_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ d_n \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(k_z + n \frac{2\pi}{L}) z} \quad (8)$$

式中 $L = l + d$ 为超晶格周期。 l 为阱宽， d 为垒宽。 (5) 式的哈密顿量满足下式：

$$H\psi_k = E\psi_k \quad (9)$$

(a) 电场下超晶格的周期势 $V(z)$ 在 (8) 式的基函数间的矩阵元为



(b)

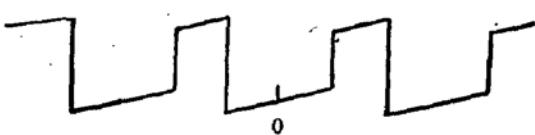


图 1 超晶格的周期势

(a) $F = 0$; (b) $F \neq 0$

$$\langle m | V(z) | n \rangle = \begin{cases} V_1 \cdot \frac{d}{L}, & n = m \\ -V_1 \cdot \frac{\sin[(n-m)\pi l/L]}{(n-m)\pi} \\ -ieFL \frac{(-1)^{n-m}}{2\pi(n-m)}, & n \neq m \end{cases} \quad (10)$$

求出 $\langle m | H_0 + V(z) | n \rangle$ 的矩阵元，解久期方程可得到空穴的能级和相应的波函数。

由于导带是各向同性的，与生长方向无关，则电子波函数可写为

$$\psi_n = e^{i(k_x z + k_y y)} \sum_n g_n \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(k_z + n \frac{2\pi}{L})z} \quad (11)$$

则光跃迁矩阵元的平方为^[11]

$$Q_{nn'} = \frac{2}{m_0} |\langle n | P \cdot \epsilon | n' \rangle|^2 \quad (12)$$

把 (8) 式 (11) 式代入上式算得

$$\begin{aligned} Q_{nn'}(z) &= \frac{2}{m_0} P^2 \frac{2}{3} \left[\left| \sum_m c_m g_m^* \right|^2 + \left| \sum_m b_m g_m^* \right|^2 \right] \\ Q_{nn'}(\parallel) &= \frac{2}{m_0} P^2 \left[\left| \sum_m a_m g_m^* \right|^2 + \frac{1}{3} \left| \sum_m c_m g_m^* \right|^2 \right. \\ &\quad \left. + \left| \sum_m d_m g_m^* \right|^2 + \frac{1}{3} \left| \sum_m b_m g_m^* \right|^2 \right] \end{aligned} \quad (13)$$

式中， $P = \langle s | P_X | X \rangle = \langle s | P_Y | Y \rangle = \langle s | P_Z | Z \rangle$ 。 $|s\rangle$ 和 $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$ 分别为导带和价带的轨道波函数， ϵ 为偏振方向的单位矢量。 $Q_{nn'}(z)$ 和 $Q_{nn'}(\parallel)$ 分别为沿 z 轴和 x , y 轴偏振的光跃迁矩阵元的平方。

下面我们考虑沿生长方向存在单轴应力的效应，则附加的哈密顿量 H_s 表示为^[22]

$$\begin{aligned} H_s &= -D_d (\epsilon_{11} + C.P.) - \frac{2}{3} D_u \left[\left(J_1^2 - \frac{1}{3} J^2 \right) \epsilon_{11} + C.P. \right] \\ &\quad - \frac{2}{3} D'_u [2\{J_1 J_2\} \epsilon_{12} + C.P.] \end{aligned} \quad (14)$$

上式已把空穴能量取正。 D_u , D'_u , D_d 为形变势， ϵ_{11} , $\epsilon_{22} \dots$ 为应变张量。 $C.P.$ 表示下标的循环排列。用 T 表示压力的大小， $T > 0$ 表示张力， $T < 0$ 表示压力。考虑单轴应力

沿 [111] 方向, 即生长方向, 应用(3)式, 把 J_1, J_2, J_3 换成 J_x, J_y, J_z , 则(14)式化为^[9]

$$H_t = -\epsilon'_a \left(J_z^2 - \frac{5}{4} \right) \quad (15)$$

其中 $\epsilon'_a = \frac{1}{3} D'_a S_{44} T$, S_{44} 为弹性协变常数。此时, 超晶格的哈密顿为

$$H = H_0 + V(z) + H_t \quad (16)$$

和前面一样求解方程(9)可得本征能量和相应的波函数。

单轴应力对导带电子能级的影响只是使能级的能量平移一个常量, 因此在计算中我们忽略了这个常量。

三、结果和讨论

本文中计算参数为: 量子阱宽 l 为 100 Å, 势垒宽度 d 为 50 Å。导带和价带的不连续性 V_{1e} 和 V_{1h} 分别为 150 meV 和 100 meV。导带电子有效质量 $m_e^* = 0.067 m_0$, 价带有效质量参数 $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.10$, $\gamma_3 = 2.90$. $2P^2/m_0 = 18.17$ eV. $\frac{2}{3} D'_a = 4.55$ eV, $S_{44} = 1.657 (10^{-3} \text{ kbar}^{-1})$. 在计算中把空穴能量取正。

当 $k_y = 0$ 时, (4)式的非对角项为零, 因此沿生长方向 (z 方向) 的空穴的哈密顿量化简为四个相互独立的分量, 相应的重空穴有效质量 $m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_3}$, 轻空穴的有效质量

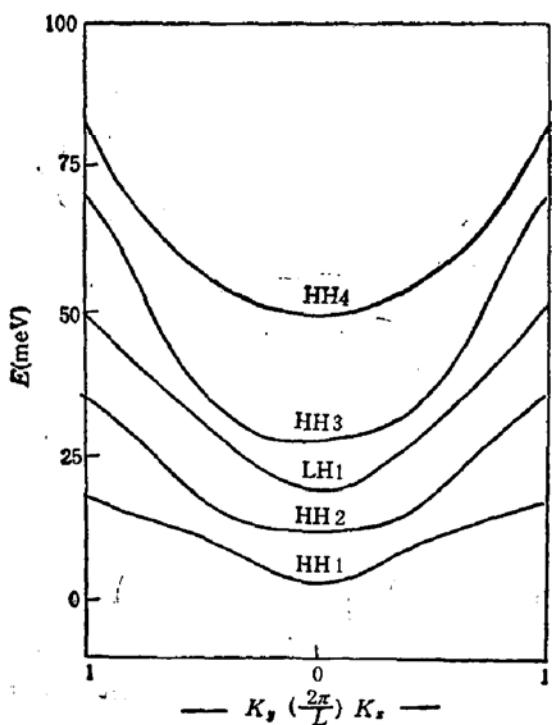


图 2 $F = 0$ 时空穴子能带的色散曲线

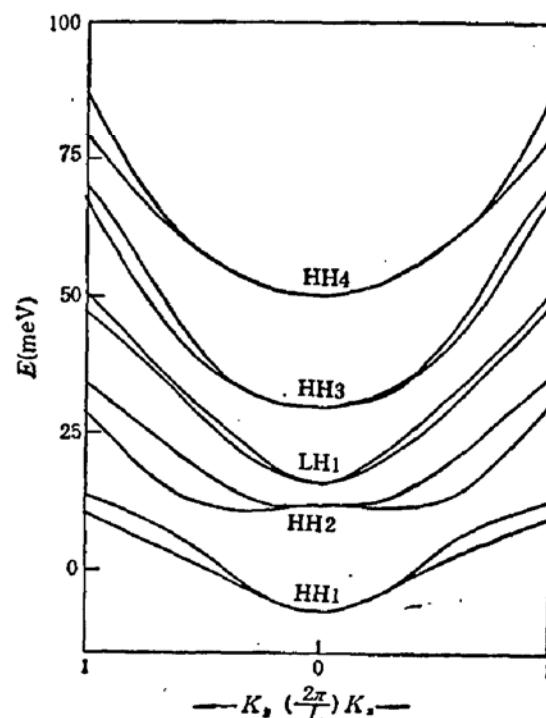


图 3 $F = 60 \text{ kV/cm}$ 时空穴子能带的色散曲线

$m_{lh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_3}$ 。而对 [001] 方向生长的超晶格, 其相应的重、轻空穴的有效质量分别为 $m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$ 和 $m_{lh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}$ 。因此理论算得 $m_{hh}^*[111]/m_{hh}^*[001] = \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{\gamma_1 - 2\gamma_3} = 2.524$, $m_{lh}^*[111]/m_{lh}^*[001] = \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{\gamma_1 + 2\gamma_3} = 0.880$ 。轻空穴有效质量几乎相等, 而重空穴有效质量相差较大。

图 2 和图 3 分别是零电场和电场强度 $F = 60 \text{ kV/cm}$ 时超晶格空穴子能带在 k_x , k_y 方向的色散曲线。可见电场为零时, 子能带是二重简并的。与文献[9]中 [001] 方向的计算结果相比, 轻重空穴的能级次序发生变化。对 [001] 情况, 前五个能级分别是 HH1, LH1, HH2, HH3, LH2; 对 [111] 情况, 见图 4, 前五个能级分别为 HH1, HH2, LH1, HH3, HH4。次序变化的主要原因是重空穴有效质量变大, 它的能级向下移(本文以价带顶能量为原点, 能量坐标取空穴能量的负值), 而轻空穴能级基本不动。比较图 2 和图 3 可见, 加电场后能级有一定的位移, 而且在 $k_z \approx 0$ 处的子能带的二重简并解除。

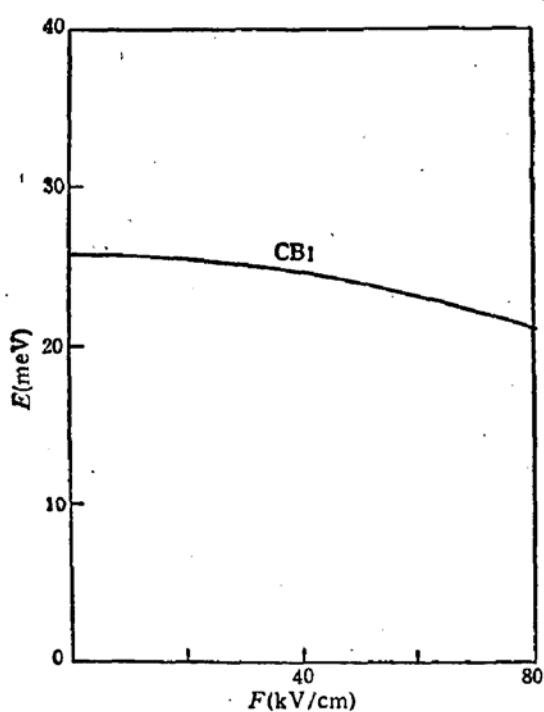


图 4 导带电子能级随电场的变化

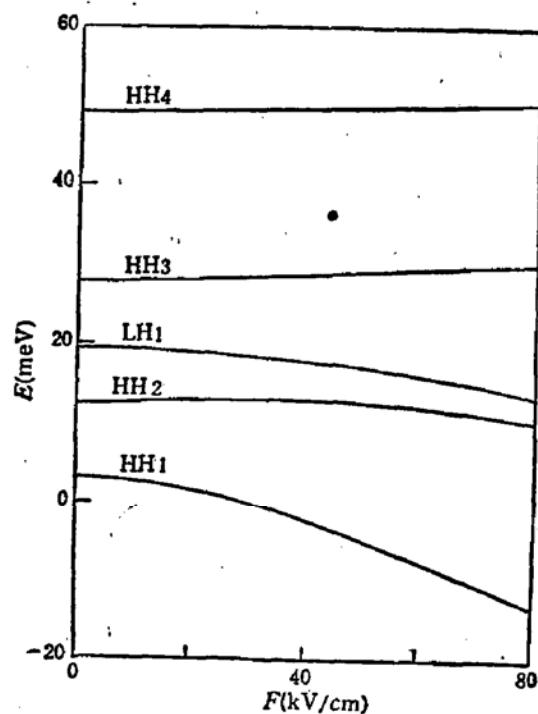


图 5 价带空穴能级随电场的变化

图 4 和图 5 分别为 $k_z = 0$ 时导带电子和价带空穴能级随电场的变化曲线。可见, 电子基态 (CB1), 重空穴基态 (HH1) 和轻空穴基态 (LH1) 的能量随电场的增大而减小。而激发态(例如 HH2) 的能量随电场的增大而略有增大。这是因为加电场后, 量子阱中电子和空穴的密度分布不再对称, 而是发生了偏移。电场越强, 偏移越大, 造成基态能量减小。而激发态由于与基态正交, 它们的密度分布的偏移和基态的相反, 即向电场的反方向偏移, 造成能量升高。图 3 中 HH1 随电场的增大出现负值能量表明能级已位移到零电场时超晶格的禁带中。

图 6 和图 7 分别是 $k_z = 0$ 时光跃迁矩阵元的平方的 (x, y) 分量和 (z) 分量随电

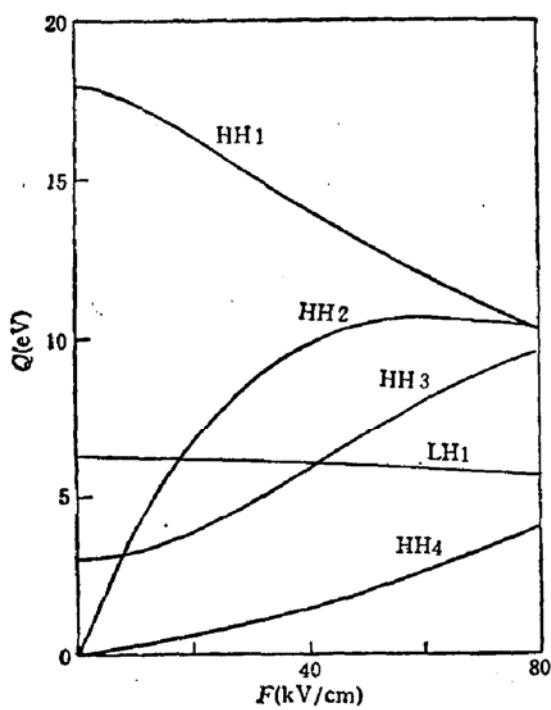
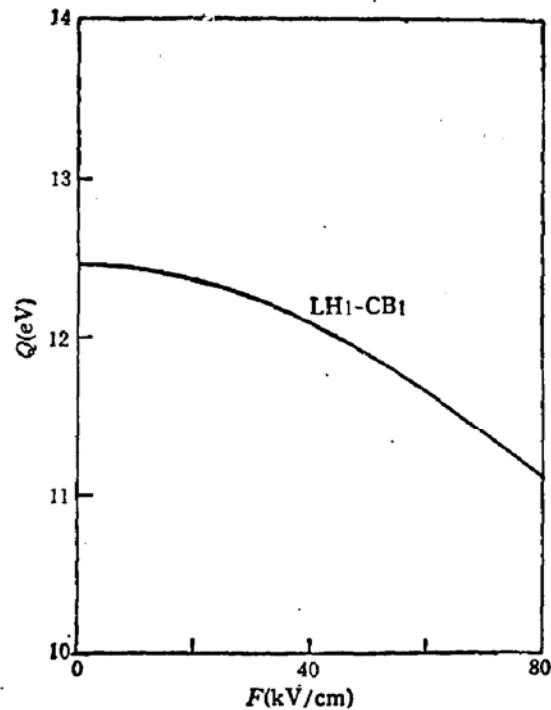
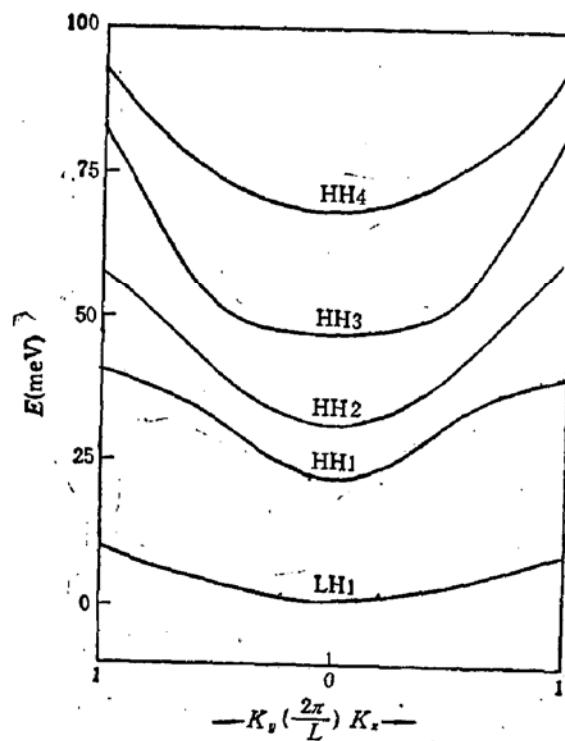
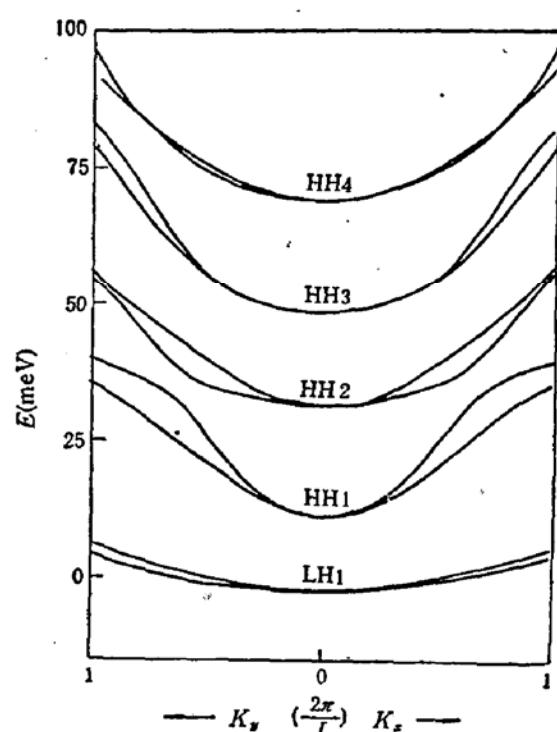
图 6 $Q_{\text{...}}(F)$ 随电场的变化图 7 $Q_{\text{...}}(Z)$ 随电场的变化

图 8 零电场下考虑单轴压力效应的价带子能带色散曲线

图 9 电场 $F = 60 \text{ kV/cm}$ 时考虑单轴压力效应的价带子能带色散曲线

场的变化曲线。计算了导带第一能级到价带前五个能级的跃迁。图 6 可见, 电场增大, $\Delta n = 0$ 的跃迁减小, 而 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁增强。由图 7 可见, $\Delta n = 0$ 的跃迁随电场增大

而减小。对 z 分量, 只出现向轻空穴的跃迁。这是因为(13)式中 $Q_{nn}(z)$ 只与轻空穴的波函数有关, 而与重空穴的波函数无关。

图8和图9分别为单轴压力为 5 kbar 时零电场和电场为 $E = 60 \text{ kV/cm}$ 的价带子能带在 k_x, k_y 方向的色散曲线。可见加电场后 $k_{\parallel} \neq 0$ 处的子能带的二重简并解除。与图2图3比较可见, 单轴压力使重空穴能级升高, 轻空穴能级下降, 导致 LH1 能级下降为最低能级。考虑单轴压力后, 轻空穴的 $E-k$ 色散曲线变得比较平缓了; 而重空穴的 $E-k$ 色散曲线变化不明显。这表明单轴压力使轻空穴有效质量变大, 而对重空穴有效质量影响不显著。

我们同样计算了单轴压力为 5 kbar 时 $k_{\parallel} = 0$ 处的光跃迁矩阵元平方随电场的变化。发现同 $T = 0$ 的计算曲线完全相同。这是因为 $k_{\parallel} = 0$ 时哈密顿量的 $4N \times 4N$ 矩阵可简化为 4 个独立的分块矩阵。其中两个描述轻空穴, 另两个描述重空穴。而附加的 H_z 项只对每个分块矩阵的对角元有贡献, 而对非对角元的贡献为零。因此只会发生能级能量的位移, 而波函数不会改变。因此光跃迁矩阵元平方也就不会改变。

四、结 论

在有效质量理论的基础上, 计算了电场下 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs [111] 超晶格的子带能级, 光跃迁矩阵元。并且考虑了单轴压力对能级次序的影响。可以得到如下结论:

1. [111] 取向超晶格的重空穴有效质量为 [001] 取向超晶格的 2.52 倍, 导致了空穴能级次序对这两种取向的超晶格是不同的。
2. 在所取电场范围 (0—80 kV/cm), 电子和空穴的基本能级随电场增大而减小, 激发态能级随电场增大而升高。
3. 价带子能带(沿 k_x, k_y 方向的色散)在电场下发生变化, 且在 $k_{\parallel} \neq 0$ 处的子能带的二重简并解除。
4. 加电场后, 在 $k_{\parallel} = 0$ 处满足 $\Delta n = 0$ 的跃迁减小, 而 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁增大。
5. 考虑单轴压力效应, 轻重空穴的能级位置发生相对变化, 价带的最低能级由 $T = 0$ 时的 HH1 变成 $T \neq 0$ 时的 LH1。且单轴压力不影响 $k_{\parallel} = 0$ 处的光跃迁矩阵元。
6. 从 $E-k$ 色散曲线来看, 单轴压力使轻空穴有效质量增大, 而对重空穴的有效质量影响不明显。

参 考 文 献

- [1] E. E. Mendez, G. Bastard, L. L. Chang, L. Esaki, H. Morkoc and R. Fisher, *Phys. Rev.*, **B26**, 7101(1982).
- [2] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, *Phys. Rev.*, **B28**, 3241(1983).
- [3] 夏建白, 黄昆, 半导体学报, **1**, 1(1988).
- [4] W. I. Wang, *Surf. Sci.*, **31**, 174(1986).
- [5] T. Hayakawa, M. Kondo, T. Suyama, K. Takahashi, S. Yamamoto and T. Hijikata, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Pt. 2, **26**, L302(1987).
- [6] T. Hayakawa, K. Takahashi, M. Kondo, T. Suyama, S. Yamamoto and T. Hijikata, *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 349 (1988).
- [7] B. V. Shanabrook, O. J. Glembocki, D. A. Broido and W. I. Wang, *Phys. Rev.*, **B39**, 3411(1989).
- [8] C. Mailhot and D. L. Smith, *Phys. Rev.*, **B35**, 1242(1987).

- [9] J. B. Xia, *Phys. Rev.*, **B**, to be published.
- [10] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.*, **102**, 1030(1956).
- [11] Y. C. Chang and J. N. Schulman, *Phys. Rev.*, **B31**, 2069(1985).
- [12] K. Suzuki and J. C. Hensel, *Phys. Rev.*, **B9**, 4184(1974).

Electronic Structures of [111]-Oriented GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs Superlattices under Electric Field

Fan Weijun and Xia Jianbai

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing, 100083)

Abstract

The electronic structures of [111]-oriented GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs superlattices under electric field are investigated by the effective mass theory. Subband dispersion curves are calculated, and compared with that of the [001]-oriented superlattice. The variations of subband energy levels and optical matrix elements at $k_{\parallel} = 0$ as functions of electric field are obtained. The double degeneracy of subband at $k_{\parallel} \neq 0$ is removed under electric field. With increasing of the electric field, the optical transitions of $\Delta n = 0$ decrease and that of $\Delta n \neq 0$ increase. Under an uniaxial stress along the growth direction, the energy levels of the heavy and light hole shift up and down, respectively, but the optical transitions under electric field are not changed for $k_{\parallel} = 0$.