

# (100)和(111)B GaAs 衬底上的 In<sub>0.14</sub>Ga<sub>0.86</sub>As/GaAs 量子阱的 发光特性和光跃迁能量计算\*

张晓波<sup>a</sup> 刘颖<sup>a</sup> 杜国同<sup>a</sup> 殷景志<sup>b</sup>

(a 吉林大学电子工程系 集成光电子学国家重点实验室 长春 130023)

(b 吉林工业大学理科部 长春 130030)

**摘要** 在(100)和(111)B GaAs 衬底上,同时用 MOCVD 生长出 In<sub>0.14</sub>Ga<sub>0.86</sub>As 多量子阱结构. 对两种晶向的样品进行了低温(2K)光致发光谱特性对比研究,测量与理论计算的光发射能量对比表明:(100)面样品两者一致,而(111)B 样品计算值比测量值高出 10~15meV. 这一差别用(111)B 面量子阱中的压电效应产生的自建电场引起的发射能量红移作出解释.

PACC: 7125T, 7855, 2820H, 7340L

## 1 引言

InGaAs/GaAs 应变量子阱结构在半导体光电器件和高速电子器件等方面都有重要应用. 多数材料都是在(100)面衬底上生长的,原因是在该晶面上外延生长容易获得好的晶体质量. 但近年来发现非(100)晶面上的外延材料具有一些特殊性质,在(111)B 面上制备的 InGaAs/GaAs 应变层结构被理论和实验证明其内部会产生自建的纵向电场<sup>[1,2]</sup>,它可能被用来制备新型自光电效应器件<sup>[3]</sup>. 掌握(111)B 面上 InGaAs/GaAs 量子阱结构的生长和发光特性有重要实际意义. 以往未发现关于(111)B 面 InGaAs/GaAs 量子阱中光跃迁能量的计算结果并由此说明其内部存在自建电场.

本文报道了通过低温光致发光对比研究(100)和(111)B 面上生长的 In<sub>0.14</sub>Ga<sub>0.86</sub>As/GaAs 三量子阱结构的结果. 在考虑了双轴压应力对量子阱中材料的能带影响后计算了两种取向量子阱中导带电子和价带空穴的基态能量以及所构成的激子态束缚能量. 计算得到的(100)晶面量子阱中电子和空穴基态间跃迁能量与光致发光发射峰值能量一致. 而计算的

\* 国家自然科学基金和国家教委博士点基金资助项目

张晓波 男,1961年生,副教授,半导体物理与器件

刘颖 男,1963年生,讲师,半导体物理与器件

杜国同 男,1945年生,教授,半导体物理与器件

1995年4月7日收到初稿,1995年11月27日收到修改稿

(111)B 面量子阱基态电子和空穴间跃迁能量比 PL 峰值能量高出  $10\sim 15\text{meV}$ . 如果将 E. A. Caridi 等人<sup>[2]</sup>计算出的量子阱中自建电场引起的发射能量红移因素考虑进去,得到了与实验相一致的结果.

## 2 InGaAs/GaAs 量子阱中的电子和空穴能量

考虑了应变对能带的影响,用包络函数方法求出电子和空穴的能量,再由变分法可得到激子束缚能. InGaAs 量子阱中的应变为<sup>[4,5]</sup>

$$\epsilon_{//,\perp} = \frac{a_{//,\perp}}{a} - 1 \quad (1)$$

$a_{//,\perp}$  为阱中晶体的平行和垂直于衬底表面的晶格常数,  $a$  为阱中晶体自由状态下的晶格常数. 在相关生长模式下  $a_{//}$  等于衬底的晶格常数 ( $a_0$ ).  $a_{\perp}$  可由  $a$  及晶体的弹性系数求得.  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  材料的自由状态晶格常数以及弹性系数是由 GaAs, InAs 的相关常数作线性延伸得到的.

在  $\Gamma$  点  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  的导带和价带能量变化可以分解为水压力和切向压应变的贡献之和. 水压力对导带和价带平均能量变化的贡献由(2), (3)两式给出

$$\Delta E_c^{\text{hy}} = a_c(2\epsilon_{//} + \epsilon_{\perp}) \quad (2)$$

$$\Delta E_{v,\text{av}}^{\text{hy}} = a_v(2\epsilon_{//} + \epsilon_{\perp}) \quad (3)$$

其中  $a_v, a_c$  分别为水压下的导带和价带形变势. 切向应变对导带  $\Gamma$  点的能量无影响, 对(100)和(111)B 面价带重空穴能量的贡献为:

$$\Delta E_{\text{hh}}^{100,\text{sh}} = b(\epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}) \quad (4)$$

$$\Delta E_{\text{hh}}^{111,\text{sh}} = \frac{2\sqrt{3}}{3}d(\epsilon_{//} - \epsilon_{\perp}) \quad (5)$$

这里  $b, d$  分别为四方和三角切变势. 由(2), (3), (4), (5)式可求出导带电子和价带重空穴之间的能量差为

$$E_c - E_v = E_g + (\Delta E_c^{\text{hy}} - \delta E_{\text{hh}}^{\text{sh}} - \Delta E_{v,\text{av}}^{\text{hy}}) \quad (6)$$

量子阱中的电子和空穴能级可利用 Bastard<sup>[6]</sup>提出的包络函数方法计算获得. 利用电子和空穴的波函数作为试探函数由变分法可得到电子和空穴之间的束缚能.

## 3 样品的生长和光致发光测量

(100)和(111)晶面半绝缘衬底经清洁处理后同时放入 MOCVD 反应室中进行外延生长. 具体生长条件为: 生长温度为  $625\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 反应室压力为  $667\text{Pa}$ , 载气总流量为  $7\text{l}/\text{min}$ ,  $V/\text{III} = 170$ , III 族源的摩尔总流量为  $15.5\mu\text{mol}/\text{min}$ , 使用 TEGa, TMIIn 和  $100\%\text{AsH}_3$  作为生长源. 样品的结构为: 在衬底上首先生长一层  $0.6\mu\text{m}$  的 GaAs 缓冲层, 然后生长三个  $\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}$  量子阱, 它们的厚度按生长速率计算为  $8\text{nm}$ ,  $4\text{nm}$  和  $2\text{nm}$ . 阱之间由  $60\text{nm}$  的 GaAs 隔离. 最后生长一层厚  $100\text{nm}$  的 GaAs 盖层.

生长后的(100)晶面样品的表面表现出与衬底生长前同样的光洁度, 而(111)B 面样品

的表面有些发乌,说明在(111)B面上生长的 InGaAs/GaAs 应变量子阱结构的表面形貌不如(100)面样品,以往有关文献给出同样的结论并提出如果使用(111)B<sup>2°</sup>偏向[100]方向会使表面形貌有较大改善<sup>[7]</sup>.即使是(100)面上生长的应变量子阱也有多篇文献报道稍偏离

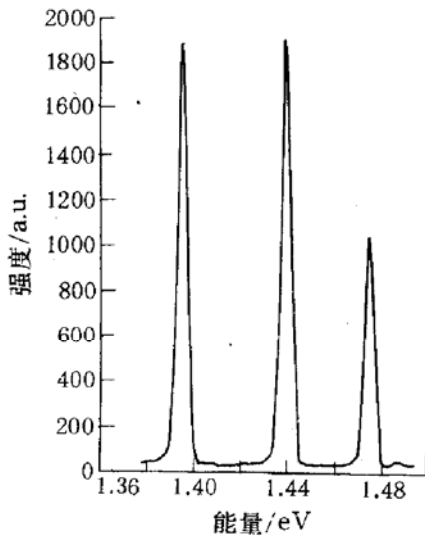


图1 (100)GaAs 衬底上 In<sub>0.14</sub>Ga<sub>0.86</sub>As/GaAs 三量子阱样品在 2K 下的 PL 光谱  
三阱的宽度分别为 2, 4, 8nm.

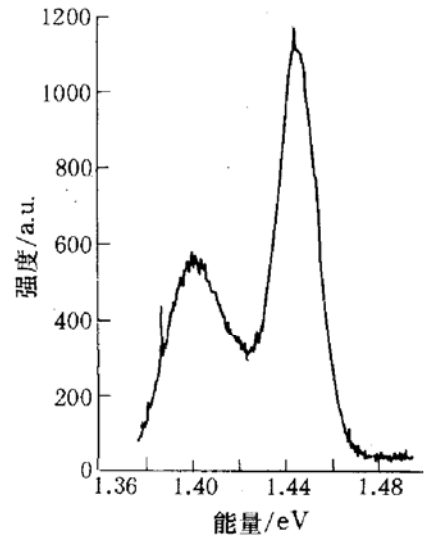


图2 (111)B GaAs 衬底上 In<sub>0.14</sub>Ga<sub>0.86</sub>As/GaAs 三量子阱样品在 2K 下的 PL 光谱  
阱宽分别为 2, 4, 8nm.

(100)晶面会产生好的结果<sup>[8]</sup>.对样品的光学特性采用低温(2K)光致发光技术检查. He-Ne 激光器作为泵浦光源. 荧光经 1.5m 单色仪色散后再经 GaAs 阴极的光电信增管接收和锁相放大器放大后输出. 样品在测量中保持在液氮中. 图 1 给出(100)面衬底上生长的样品的光致发光谱,三个阱宽 2nm, 4nm 和 8nm 的发射峰半宽(FWHM)分别为 4.9meV, 4.5meV 和 4.5meV. 与 4nm 和 8nm 二阱相比, 2nm 阱尽管距表面近但它的发光强度却相当于其它两阱 PL 光强的一半, 其 PL 半宽也略有增加. 影响上述结果的因素很多, 如 Ga/In 的互扩散对窄阱的影响大<sup>[9]</sup>, 窄阱中电子能级高, 部分载流子由于热运动而摆脱阱的束缚<sup>[10]</sup>. 图 2 为(111)面衬底上生长的样品的光致发光谱, 其中的两个峰分别来自于阱宽为 2nm 和 4nm 的两个阱中的基态电子到基态重空穴之间的跃迁, 而由 8nm 阱中的光发射产生的信号由于探测器频谱响应范围限制未得到. 对比图 1 和图 2, 可发现后者的光谱半宽比前者大很多, 发光强度也小. 其中 2nm 阱的发光强度大于 4nm 阱可能是由于前者距表面近, 由此阱发出的光只受到表面盖层吸收, 而其它阱的发射光还要受到它上面阱或垒层的吸收. (111)B 面样品的晶体完整性不如(100)面样品, 因此, 这种光吸收作用在前种样品中比较强, 考虑这一因素后, 两种样品中表现出的不同 PL 特性就可以理解了.

#### 4 光跃迁能量的测量与计算结果讨论

按本文第 2 部分介绍的理论方法, 计算的(100)面量子阱基态电子到基态重空穴( $e_1, hh_1$ )的辐射复合能量(包含激子束缚能)与测量得到的 PL 谱峰值能量基本一致, 结果列于表 1. 而对(111)B 面量子阱计算值比测量值高出 10~15meV. 我们认为这一理论与测量偏差是由于量子阱中存在自建电场引起的量子 Stark 效应, 从而导致发射能量红移.

表 1 两种晶体取向样品的光致发光数据和计算的光跃迁能量及激子束缚能

阱宽		2nm		4nm		8nm	
晶面		(100)	(111)B	(100)	(111)B	(100)	(111)B
测量	PL/meV	1475	1445	1440	1400	1393	
	FWHM/meV	4.9	20	4.5	33	4.5	
	相对强度	0.5	0.6	1	0.3	1	
计算	$e_1hh_1/\text{meV}$	1485	1468	1445	1417	1400	1326
	激子束缚能/meV	-7.25	-8.046	-7.757	-6.297	-7.316	-5.121

由测量和理论计算两者偏差值  $10\sim 15\text{meV}$ , 由此估计(111)B 面样品量子阱中的自建电场强度为  $\sim 1\times 10^5\text{V}/\text{cm}$ , 这个值与有关文献中给的结果  $2\times 10^5\text{V}/\text{cm}$  相当<sup>[2]</sup>. 表 1 中给出了两种晶体取向衬底上生长的 InGaAs 量子阱的 PL 数据和对应的理论计算结果.

## 5 结论

MOCVD 方法在(100)和(111)B 面 GaAs 衬底上生长了  $\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}/\text{GaAs}$  三量子阱结构. 低温光致发光方法研究了两种晶面上生长的量子阱材料的质量以及它们的发光特性. 考虑了应变对能带结构的作用计算了两种量子阱中的电子和重空穴能量. 对(100)样品计算的  $e_1hh_1$  及激子束缚能共同决定的光跃迁能量与测量的 PL 峰值能量符合很好, 而对(111)B 样品在考虑了其内部自建电场的作用后计算和测量值相符. 由此间接证明了(111)B 面 In-GaAs/GaAs 应变量子阱中的自建电场的存在.

本文中的样品制备和低温光致发光测量是作者在法国 Montpellier I 大学完成的.

## 参 考 文 献

- [1] D. L. Smith, Solid State Commun., 1986, **57**(12):919~921.
- [2] E. A. Caridi, T. Y. Chang, K. W. Goossen *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1990, **56**(7):659~661.
- [3] K. W. Goossen, E. A. Caridi, T. Y. Chang *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1990, **56**(7):715~717.
- [4] Chris G. Van de Walle, Phys. Rev., 1989, **B39**(3):1871~1883.
- [5] M. P. C. Krijn, Semicond. Sci. Technol., 1991, **6**(1):27~34.
- [6] G. Bastard, Phys. Rev., 1981, **B24**(10):5693~5697.
- [7] T. S. Moise, L. J. Guido, J. C. Beggy *et al.*, J. Electron. Mater., 1992, **21**(1):119~124.
- [8] C. Monier, J. Leymarie, A. Marticshin *et al.*, J. de Physique, 1993, **3**(5):295~300.
- [9] F. H. Kawa, P. Motisuke, J. A. Brum *et al.*, J. Cryst. Growth, 1988, **93**(1~4):336~341.
- [10] Z. S. Piao, H. I. Jeon, S. S. Cha *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1994, **65**(3):333~335.

## Photoluminescence and Optical Transition in (100) and (111)B Oriented $\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}/\text{GaAs}$ Strained Quantum Wells

Zhang Xiaobo, Liu Ying and Du Guotong

*(Department of Electronics Engineering and National Integrated Opto-electronics Laboratory, Jilin University, Changchun 130023)*

Yin Jingzhi

*(Jilin University of Technology, Changchun 130030)*

Received 7 April 1995, revised manuscript received 27 November 1995

**Abstract**  $\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}/\text{GaAs}$  strained multi-quantum wells have been grown on (100) and (111)B GaAs substrate by MOCVD. Photoluminescence at temperature of 2K were used to characterize the samples. The PL peaks agree well with calculated  $e_1hh_1$  transitions with exciton binding energy included for (100) oriented wells, whereas a red shift happens for (111)B wells. This red shift is interpreted by self-built electric field in (111)B sample.

**PACC:** 7125T, 7855, 2820H, 7340L