

用静压光致发光研究 GaAs/AlAs 超短周期超晶格导带最低能级的特性*

李国华 刘振先 韩和相 汪兆平 江德生

(半导体超晶格国家重点实验室,中国科学院半导体研究所,北京, 100083)

Klaus. Ploog

(Max-Planck Institute Für Festkörperforschung, Germany)

1991年12月17日收到

在 77 K 下, 0—30 kbar 静压范围内研究了 GaAs/AlAs 超短周期超晶格的静压光致发光。测得 $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$ 的光致发光峰的压力系数为 -1.35 meV/kbar , 表明它的导带最低能级具有体材料 X 谷的特性而不是大多数理论计算所预计的 L 谷特性。测得 $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_m$ 的光致发光峰的压力系数是 8.69 meV/kbar , 表明它是 GaAs/AlAs 超晶格中周期最短的 I 类超晶格。

PACC: 7320, 7855, 6250

近年来对 GaAs/AlAs 短周期超晶格已经进行了许多理论和实验研究。其中一个主要的问题是关于它的导带最低能级的特性。因为 GaAs 是导带最低能谷在 Γ 点的直接带半导体, 而 AlAs 是 X 谷为最低能谷的间接带半导体。因此当 GaAs 和 AlAs 沿

(001) 方向交替生长形成超晶格时, 由两者的 X 谷和 L 谷组成的势阱结构将落在由 Γ 谷组成的势阱结构中(如图 1 所示)。而且由于界面处的价带不连续性, X 谷电子的势阱是 AlAs 层而不是 GaAs 层。这样就使 GaAs/AlAs 超晶格的导带最低能级具有比较复杂的行为。随着组成超晶格的 GaAs 层和 AlAs 层的厚度不同, 它可能具有体材料 Γ 谷的特性, 成为直接带隙的 I 类超晶格。也可能具有体材料的 X_z 谷(折叠到超晶格布里渊区中心)或 X_{xy} 谷(折叠到超晶格布里渊区边界)的特性, 从而成为膺直接的(k 空间在同一点, 实空间分离)或间接的(k 空

图 1 GaAs/AlAs 超晶格能带结构示意图

域空间在同一点, 实空间分离)或间接的(k 空

* 国家自然科学基金资助项目。

间和实空间均分离)的第 II 类超晶格。还有可能具有体材料 L 谷的特性而成为间接的第 I 类超晶格^[1]。对于 $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$ ($n \geq 4$) 的对称短周期超晶格, 理论计算^[2]和静压光致发光实验^[3]都已证实, 当 $n > 11$ 时它是 I 类超晶格。 $n < 11$ 时它是 II 类超晶格, 导带最低能级具有体材料 X_z 谷的特点。这儿 n 是单分子层数, 每个单分子层厚约 2.83 Å。但对于 $n < 4$ 的超短周期超晶格, 特别是 $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ 超晶格, 研究得还很不充分。Wei 和 Zunger^[4] 曾用第一原理的计算方法计算了 $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ 的能带结构, 得到导带最低能级在超晶格布里渊区的 R 点, 具有体材料 L 谷的特点。(为简明起见, 下面我们把具有体材料 L 谷特性的态称为类 L 态。 Γ 和 X 也如此。)他们算得的其它几个导带态按能量从低到高分别是类 X_{xy} 态, 类 X_{xy} 态, 类 X_z 态和类 Γ 态。类似的第一原理计算还有 Zhang 等^[5]和 Gopalan 等^[6]。它们算得的导带最低能级也都是类 L 态, 其它导带能级的次序略有不同。此外, Nakayama 和 Kamimura^[7] 的自洽赝势计算, Fujimoto 等^[8]的紧束缚计算也都得到导带最低能级是类 L 态。最近, 范卫军等^[9]用第一原理方法计算了 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 的能带结构和压力系数。他们算得导带最低能级的压力系数为 3.42 meV/kbar, 支持类 L 态的预计。关于 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 超晶格的实验结果并不很多。Ishibashi 等^[10]和 Kabayashi 等^[11]曾用光致发光的强度判断它是间接能隙。Nagle 等^[12]和 Jiang 等^[13]曾用光致发光峰与光致发光激发谱阈值相差很大来判定它是最低能级为类 X 态的第 II 类超晶格。但这两种方法都很难区分最低能级究竟是类 X 态还是类 L 态。Ge 等^[14,15]曾仔细研究了 $1 \leq n \leq 4$ 的 $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$ 超短周期超晶格。他们从光致发光峰的瞬态特性, 光致发光激发谱, 特别是单轴应力下的光致发光谱来判定 $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ 超晶格的导带最低能级是类 X_{xy} 态。这样实验结果与理论计算就有很大的差异。

关于 $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$ 的理论计算和实验结果更少见。Gopalan 等^[6]算得它是 I 类超晶格, 这与 Nagle 等^[12]的实验结果一致。最近范卫军等^[9]算得它的压力系数为 6.94 meV/kbar, 但还未有实验证。

静压下的光致发光是研究 GaAs/AlAs 超晶格的导带最低能级的特性的有力工具^[3]。由于 GaAs 和 AlAs 体材料的 Γ 、 X 、 L 谷的压力系数不同。(如 GaAs 的 Γ 、 X 、 L 谷的压力系数分别为 10.7、-1.3 和 5.5 meV/kbar.)^[16]。因此从超晶格光致发光峰的压力系数可以明确地判断它的导带最低能级具有体材料哪个能谷的特性。

本文报道了对 $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$, $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$ 和 $(\text{GaAs})_4/(\text{AlAs})_4$ 的 77K 静压光致发光的研究。从它们的光致发光峰的压力系数确定: $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$ 是 I 类超晶格。而 $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ 和 $(\text{GaAs})_4/(\text{AlAs})_4$ 均是导带最低能级为类 X 能级的 II 类超晶格。

样品用 MBE 方法生长在 (001) 晶向的 GaAs 衬底上。具体生长细节见文献[12]。压力由金刚石对顶砧压室得到。光致发光谱在自建的显微光谱系统上测量。激发光源是氩离子激光器的 4880 Å 线。测量在液氮温度进行。详细实验方法见文献[3]。

图 2 给出了 $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$, $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$ 和 $(\text{GaAs})_4/(\text{AlAs})_4$ 三块样品在不同压力下的光致发光谱。常压下在 $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ 的光致发光谱中观察到两个峰, 其中主峰 E_1 的能量位置为 2.074 eV, 与文献[14]的值很接近。对应于导带最低能级到

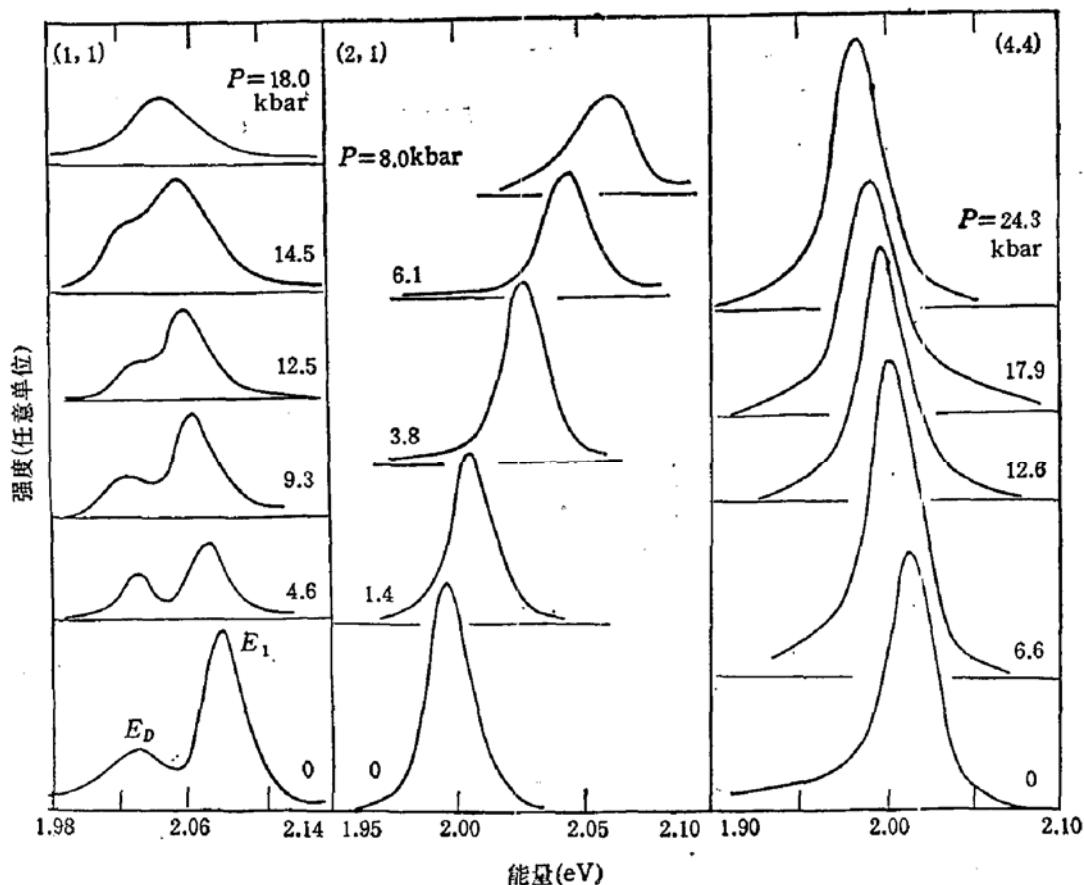


图 2 GaAs/AlAs 超短周期超晶格在几个压力下的 77 K 光致发光谱 (m, n) 代表 $(\text{GaAs})_m/(\text{AlAs})_n$

表 1 GaAs/AlAs 超晶格的常压下峰值能量 $E(0)$ 和压力系数 α

样品	$E(0)$ (eV)	α (meV/kbar)
$(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$	2.074 ± 0.002	-1.35 ± 0.14
$(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$	1.995 ± 0.001	8.69 ± 0.07
$(\text{GaAs})_4/(\text{AlAs})_4$	2.012 ± 0.001	-1.27 ± 0.03

价带重空穴子带的跃迁发光。低能端距主峰约 50 meV 处还有一小峰 E_D 。它的峰值位置基本上不随压力而变化,因此它是与缺陷有关的非本征发光。随着压力的升高, E_1 峰逐渐向低能方向移动,具有与体材料 X 谷相似的特性。从而可以明确地判定它是类 X 态而不是如理论计算所预计的类 L 态。在 $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$ 超晶格的光致发光谱中,光致发光峰随压力很快地向高能方向移动,压力系数与体材料 Γ 谷的相似,因此它的导带最低能级是类 Γ 态。这应该是 GaAs/AlAs 超晶格中周期最短的 I 类超晶格。峰值能量为 1.995 eV (6216 Å),落在橙色光范围内。可望在器件方面有一定的应用前景。 $(\text{GaAs})_4/(\text{AlAs})_4$ 超晶格的光致发光峰随压力向低能方向移动,因此它也是 II 类超晶格。它的发光强度界于上述两块样品之间。

图 3 是光致发光峰的峰值能量随压力的变化。图中实线是用线性关系式

$$E(p) = E(0) + \alpha p$$

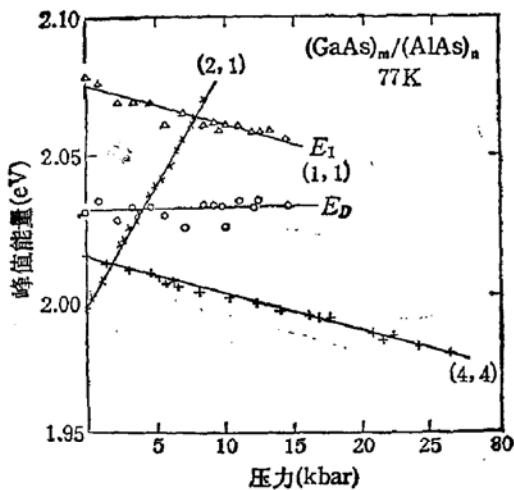


图3 GaAs/AlAs 超晶格光致发光峰的峰值能量随压力的变化

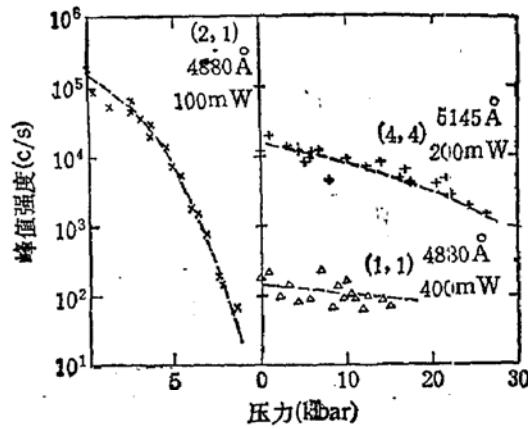


图4 GaAs/AlAs 超晶格光致发光峰的峰值强度随压力的变化,激光器出射功率已标在图中

对实验数据进行最小二乘法拟合的结果。拟合得到的常压下峰值能量 $E(0)$ 和压力系数 a 在表 1 中列出。

图 4 给出了光致发光峰的峰值强度随压力的变化。图中虚线是为了便于观察而画的。测量时的激发功率(激光器出射功率)也标在图中以便相互比较。其它实验条件均相同。可以看到常压下 $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_1$ 的发光强度最大。但它随压力的增加而接近指数地衰减。这是由于电子从类 Γ 态向类 X 态的转移而造成的^[3]。从强度的衰减估算出类 X 态的压力系数为 $-0.6 \pm 0.5 \text{ meV/kbar}$ 。 $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_4$ 的发光强度次之。 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 的最弱。它们随压力只有轻微的变化。

我们的 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 的静压光致发光实验结果与 Ge 等的单轴应力的结果^[14]是互相支持的,都得到它的导带最低能级是类 X 态而不是如大多数理论计算所预期的类 L 态。一个可能的原因是理论计算处理的是理想的超晶格,而实际样品中界面不平整引起的无序效应对 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 超晶格是不可忽略的。因此考虑了无序效应在内的计算可能会给出与实验数据更接近的结果。

Ge 等^[14]曾指出,在 $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_n$ 超短周期超晶格中, $n \geq 4$ 时最低能级是类 X_Z 态,而 $n = 1, 2, 3$ 时最低能级是类 X_{XY} 态。虽然从静压压力系数不能直接区分这两种情况。但在我们的实验中。 $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_4$ 的压力系数值不但比 $n > 8$ 的值(-2 meV/kbar)要小很多^[17]。而且比 GaAs 体材料的值^[18]还要小。它的发光强度随压力也在逐渐减小。这些都表明它的类 X 态与类 Γ 态有比较明显的混合。这是类 X_Z 态的特点。在 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 超晶格中,压力系数与 GaAs 体材料的接近相同。发光强度比 $n = 4$ 要小近二个数量级,而且基本上不随压力增加而下降。这些都是类 X_{XY} 态的特点。因此我们的实验结果是支持文献[14]的判断的。

总之,我们测得 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 超晶格光致发光峰的压力系数为 -1.35 meV/kbar ,表明它的导带最低能级是类 X 态而不是如理论预期的类 L 态。测得 $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_1$ 超晶格的压力系数为 8.69 meV/kbar 证实它是直接跃迁的 I 类超晶格。从 $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_4$ 和 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ 的实验结果的对比分析得知前者的最低能级为类

X_z 态而后者为类 X_{xy} 态。

致谢：作者感谢夏建白研究员和范卫军同志的有意义的讨论。

参 考 文 献

- [1] L. J. Sham and Y. T. Lu, *J. Lum.*, **44**, 207(1989).
- [2] J. B. Xia and Y. C. Chang, *Phys. Rev.*, **B42**, 1781(1990).
- [3] G. Li, D. Jiang, H. Han, Z. Wang and K. Ploog, *Phys. Rev.*, **B40**, 10430(1989).
- [4] S. H. Wei and A. Zunger, *J. Appl. Phys.*, **63**, 5794(1989).
- [5] S. B. Zhang, M. S. Hybertsen, M. L. Cohen, S. G. Louie and D. Tomanek, *Phys. Rev. Lett.*, **63**, 1495(1989).
- [6] S. Gopalan, N. E. Christensen and M. Cardona, *Phys. Rev.*, **B39**, 5165(1989).
- [7] T. Nakayama and H. Kamimura, *J. Phys. Soc. of Jpn.*, **54**, 4726(1985).
- [8] H. Fujimoto, C. Hamaguchi, T. Nakazawa, K. Taniguchi, K. Imanishi, H. Kato and Y. Watanabe, *Phys. Rev.*, **B41**, 7593(1990).
- [9] 范卫军、顾宗权、夏建白、李国华, 物理学报, 将发表。
- [10] A. Ishibashi, Y. Mori, M. Itabashi and N. Watanabe, *J. Appl. Phys.*, **58**, 2691(1985).
- [11] N. Kobayashi and Y. Horikoshi, *Appl. Phys. Lett.*, **50**, 909(1987).
- [12] J. Nagle, M. Garriga, W. Stoltz, T. Isu and K. Ploog, *J. Physique*, **48**, c5-495(1987).
- [13] D. S. Jiang, K. Kelting, T. Isu, H. J. Queisser and K. Ploog, *J. Appl. Phys.*, **63**, 845(1988).
- [14] W. Ge, M. D. Sturge, W. D. Schmidt, L. N. Pfeiffer and K. W. West, *Appl. Phys. Lett.*, **57**, 55(1990).
- [15] W. Ge, W. D. Schmidt, M. D. Sturge, L. N. Pfeiffer and K. W. West, *Phys. Rev.*, **B44**, 3432(1991).
- [16] Landolt-Bornstein, New Series, Group III, Vol. 17a (Springer Berlin, 1982).
- [17] G. Li, D. Jiang, H. Han, Z. Wang and K. Ploog, *J. Lum.*, **46**, 261(1990).
- [18] D. J. Wollard and J. A. Bradley, *Solid State Commun.*, **53**, 1069(1985).

Character of Lowest Conduction States of Ultra-Short Period GaAs/AlAs Superlattices Investigated by Photoluminescence under Pressure

Li Guohua, Liu Zhenxian, Han Hexiang, Wang Zhaoping and Jiang Desheng
(National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing,
100083)

Klaus Ploog

(Max-Planck Institute für Festkörperforschung, Germany)

Abstract

The photoluminescence of ultra-short period GaAs/AlAs superlattices has been investigated at 77K under hydrostatic pressure up to 30 kbar. The measured pressure coefficient of the emission peak for $(\text{GaAs})_1/(\text{AlAs})_1$ is -1.35 meV/kbar . It demonstrates that the lowest conduction state has the character of X valley of the bulk materials rather than L valley predicted by theoretical calculations. The measured pressure coefficient for $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$ is 8.69 meV/kbar , which indicates that $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_1$ is the thinnest type-I superlattice in GaAs/AlAs system.

ACC: 7320, 7855, 6250