

短周期 GaAs/AlAs 超晶格的光频 介电函数谱理论的实验检验

莫 党 谭健华

(中山大学物理系 广州 510275) (半导体超晶格国家重点实验室 北京 100083)

陈宗圭 杨小平 张鹏华 张 伟

(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)

陈良尧

(复旦大学物理系 上海 200433)

摘要 我们制备了 $M=2, 4, 6$ 和 10 的一系列短周期 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格样品并测量了其椭圆光谱. 对这些样品的光频介电函数谱进行了分析, 并与夏建白等的理论计算结果作了直接比较. 上述理论计算是对 $M=4, 6$ 和 10 的超晶格样品作出的, 并给出相应的介电函数谱曲线. 在光子能量 $3.5 \sim 4.5 \text{eV}$ 范围的 E_1 峰与 \tilde{E}_1 峰附近的实验谱的主要特征, 与理论计算结果相一致. 实验谱中的 \tilde{E}_1 峰比理论谱要强些, 不同 M 值的超晶格样品之间的 \tilde{E}_1 峰之差异也大于理论结果.

PACC: 6865, 7865, 7360, 0760F

1 引言

短周期 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格是一类受到人们注意的超晶格, 已有不少的研究. 这种超晶格的基本单元由 M 原子层的 GaAs 与 M 原子层的 AlAs 组成. GaAs 是直接带隙半导体, AlAs 则是间接带隙的. 短周期 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格随着原子层数 M 的增加, 将发生直接能隙与间接能隙的交叉 (即 Γ -X 交叉).

有一些理论工作计算短周期 GaAs/AlAs 超晶格的电子能带结构, 并着重讨论 Γ -X 交叉问题. 不同工作得到不同的发生 Γ -X 交叉的 M 值. 夏建白^[1]用经验赝势法进行计算, 得到

莫 党 男, 1934 年生, 教授, 从事固体光学性质和椭圆光谱研究
陈宗圭 男, 从事半导体超晶格制备与研究
陈良尧 男, 1950 年生, 教授, 从事固体光性和光谱研究
1994 年 9 月 20 日收到本文

$M > 10$. Ihm^[2]用最近邻紧束缚模型计算,表明 Γ -X 交叉发生在 30 \AA GaAs 层厚处. Brey 等^[3]也是用最近邻紧束缚模型,得到 Γ -X 交叉发生在 $M=18$ 处,但是,他只考虑最近邻,得不到正确的超晶格能带结构,例如 X 态结果与实际不符. 因此,考虑次近邻是重要的. Lu 等^[4]和 Fujimoto 等^[5]用包含次近邻互作用的经验紧束缚模型进行能带计算,但结果与 Ting 等^[6]用 Wannier 模型得到的不同. 夏建白等^[7]用包含次近邻互作用的经验紧束缚模型计算了短周期超晶格的电子结构,指出正确选择紧束缚参数的重要性,得到了正确的能带结构, Γ -X 交叉值也与实验数据相一致. 夏建白等还进一步计算了超晶格的介电函数谱. 以前一些关于超晶格介电函数的理论计算^[8,9]局限在直接带隙附近,文献[7]则给出了整个能量范围的超晶格介电函数谱.

在实验方面,多数工作是测量带隙附近的光学性质,很少在整个紫外-可见区对超晶格的介电函数谱进行测量. Garriga 等^[10]用椭偏谱法测得短周期 GaAs/AlAs 超晶格的介电函数谱,发现超短周期($M=1$ 和 $M=3$)时介电函数虚部 ϵ_2 谱有两个峰,与 \tilde{E}_1 和 $\tilde{E}_0 + \tilde{E}_2$ 跃迁相关. 夏建白等理论工作^[7]定性上与这实验结果一致. 看来文献[7]的结果比以前的一些理论工作更符合实际,近年来也得到较广引用. 但该理论还难用过去有的实验结果^[10]作直接的细致的检验,因为理论计算的是 $M=4, 6$ 和 10 的介电函数谱,而文献[10]只给出 $M=1, 3$ 和 15 的实验曲线. Garriga 等测量在夏建白等计算之前的,文献[7]理论工作以后还未有新的实验工作. 所以,专门设计和制备一套短周期 GaAs/AlAs 超晶格样品,测量其介电函数谱,并直接与文献[7]的计算结果进行对比,检验该理论的正确程度,是有意义的,也是本工作的目的.

我们设计和制备了 $M=2, 4, 6$ 和 10 的短周期 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格样品,测量了紫外-可见区的椭偏光谱,得到介电函数谱,然后与 $M=4, 6$ 和 10 理论结果相比较.

2 实验和椭偏光谱结果

短周期 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格样品是在半导体超晶格国家重点实验室用分子束外延(MBE)方法制备的. 在(100)半绝缘 GaAs 基底上,首先生长一层 $0.5 \mu\text{m}$ 厚的 GaAs 缓冲层,然后生长短周期 GaAs/AlAs 超晶格,由 M 原子层的 GaAs 与 M 原子层的 AlAs 交替组成. 样品的实际层厚,由 X 射线双晶衍射加以检测. 从衍射卫星峰看出,样品的超晶格周期均一性很好. 表 1 列出各样品的周期与周期数.

表 1 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格样品的周期和周期数

样品号	原子层数 M	周期 $d(\text{\AA})$	周期数
1	2	12	350
2	4	24	180
3	6	34	120
4	10	56	100

椭偏光谱是用改进型双转动扫描椭偏仪^[11]测量的. 测量的光子能量范围为 $1.5-4.5 \text{ eV}$,扫描间隔为 0.05 eV . 图 1 和图 2 分别是 1 号样品[即 $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$ 超晶格]和 4

号样品[即 $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_{10}$ 超晶格]的椭偏光谱结果.

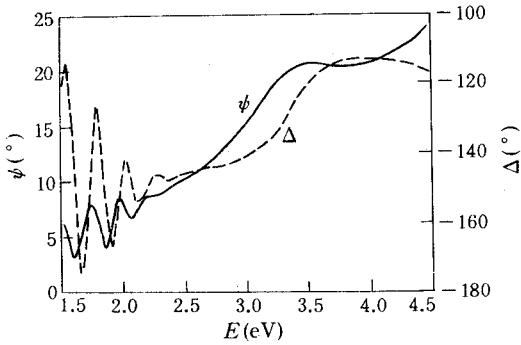


图1 $(\text{GaAs})_2/(\text{AlAs})_2$ 超晶格样品的椭偏光谱
实线为 Ψ 谱 虚线为 Δ 谱

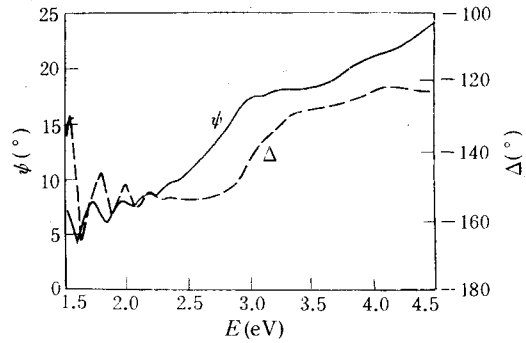


图2 $(\text{GaAs})_{10}/(\text{AlAs})_{10}$ 超晶格样品的椭偏光谱
实线为 Ψ 谱 虚线为 Δ 谱

3 介电函数结果及与理论比较

由椭偏光谱抽象算为介电函数谱,我们采用多层模型来进行分析.超晶格本身本来是一种多层结构,但 M 足够小时更适宜将之当作一个整体,用超晶格整体的光学常数(或介电函数)来表征.这正如文献[7]的理论工作那样做.这样,处理椭偏光谱数据时,便采用空气-氧化层-超晶格-衬底结构的4层模型.用有关的椭偏公式(可参见文献[12,13])进行数据处理,便得到短周期GaAs/AlAs超晶格的介电函数谱.

图3是各个超晶格样品的介电函数虚部 ϵ_2 谱,图4则是相应的实部 ϵ_1 谱.与文献[7]相仿,图3和图4中除了 $M=2,4,6$ 和10的四个样品结果外,还给出GaAs与AlAs的平均值曲线以便比较.

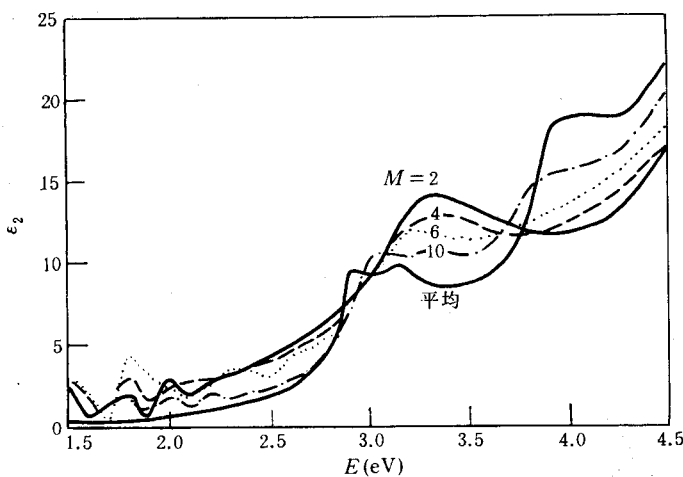


图3 实验测得的 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格样品的介电函数虚部 ϵ_2 谱
以及GaAs和AlAs的 ϵ_2 的平均值曲线

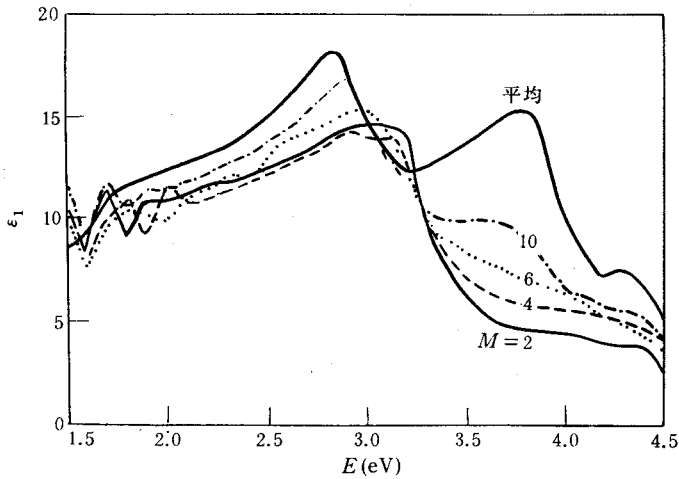


图 4 实验测得的 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格样品的介电函数实部 ϵ_1 谱以及 GaAs 和 AlAs 的 ϵ_1 的平均值曲线

由图可见, 1.5—2.5eV 范围的 ϵ_1 与 ϵ_2 曲线出现一系列的振荡结构, 这是因为在这波段范围内超晶格材料比较透明, 出现多次反射产生的干涉效应. 这时不再适宜把超晶格当作一个整体(即单层)来看待, 对超晶格本身就需用多层模型. 但是, 1.5—2.5eV 范围不是文献 [7] 的理论计算所得的介电函数谱主要部位, 下面不再对此进行分析.

2.5—4.0eV 范围的介电函数谱对应于 E_1 峰与 \tilde{E}_1 峰结构, 其谱形如何随原子层数 M 增加而发生变化, 是我们在下面将要着重加以分析, 并与理论结果 [7] 进行比较的.

文献 [7] 算出的理论谱的能量上限为 6.0eV, 4.5eV 以上的 ϵ_2 谱出现 \tilde{E}_2 峰与 E_2 峰结构, 但不同 M 值的结果相差很小(见下面图 5 和图 6). $E > 4.5\text{eV}$ 的波段, 已趋向真空紫外区, 处于本工作实验范围之外了.

图 5 和图 6 是夏建白等 [7] 理论计算得到的 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格的介电函数 ϵ_2 和 ϵ_1 谱. 其中 $M = 4, 6$ 和 10. 还附上 GaAs 体材料与 AlAs 体材料的平均 ϵ_2 和 ϵ_1 谱. 由于本实验工作的样品是预光设计的, 故图 3 和图 4 可与图 5 和图 6 作直接比较.

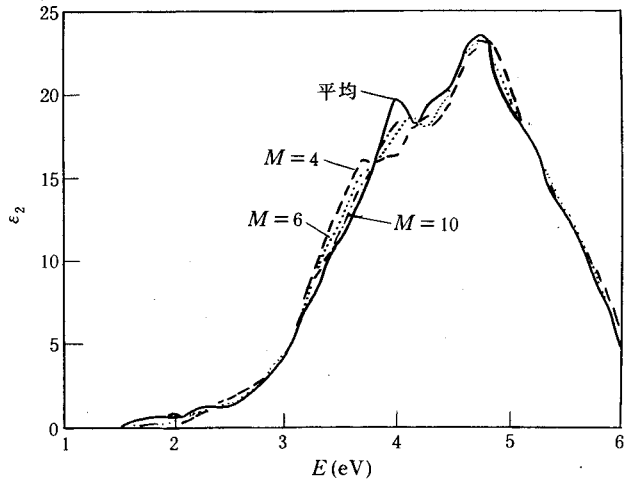


图 5 理论计算出的 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格的介电函数虚部 ϵ_2 谱, 引自 [7]

比较实验结果与理论结果, 可看出有如下的一些特点:

(1) 不同 M 值的 ϵ_2 理论谱在 E_1 峰附近呈现较大的差别(见图 5), 实验结果与观察到这

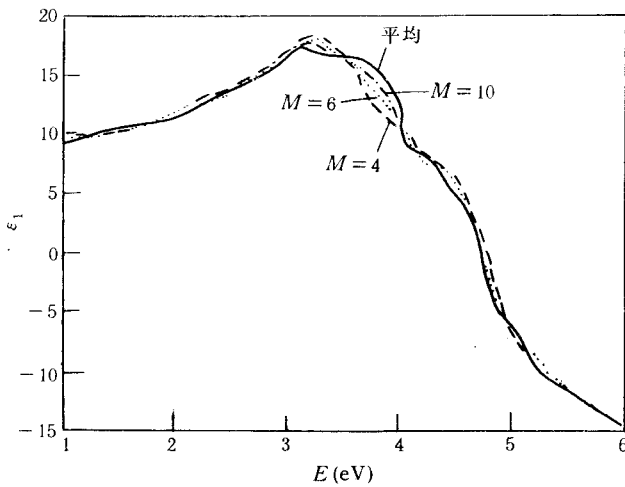


图 6 理论算出的 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格的介电函数实部 ϵ_1 谱, 引自 [7]

变化趋势. 这现象来源于 GaAs 与 AlAs 的 E_1 能带结构有较大差异.

(2) 从 ϵ_2 理论谱(图 5)可看到不同 M 值有曲线有一个交叉点, 约在 3.8eV. 能量低于此点的区域中 M 值小的曲线比 M 值大的曲线要高. 而能量高于交叉点时则 M 值大的曲线高. 实验结果亦显示出一交叉点, 约在 3.7eV. 同样在交叉点左边 M 小的曲线高而右边 M 大的曲线高. ϵ_1 谱亦有对应的变化规律.

(3) 在 3.0—3.5eV 处 ϵ_2 实验曲线出现一个谱峰, 而且随着 M 值增加向低能方向移动, 当 $M=10$ 时退化成为台阶. 理论曲线中, 该谱峰不

突出, 只呈现较小的台阶, 但其变化趋势与实验结果相似.

(4) 不同 M 值的实验曲线之间的差别, 则比理论结果要大些.

实验结果在 3.3eV 附近出现较强的谱峰, 而理论结果这点不明显, 我们认为这是由于文献 [7] 的计算中没有考虑激子效应. Hanke 等 [14] 计算了激子效应与定域效应对 Si 介电函数谱的修正, 表明激子效应增强了 ϵ_2 的 E_1 峰. 预计对于 GaAs/AlAs 超晶格也会有类似结果.

经过较仔细的比较, 可以说, 实验上较好的地验证了夏建白等的理论计算结果 [7]. 即使理论上设计及激子效应, 短周期 $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ 超晶格的介电函数理论谱的主要特征也与实验结果相符合.

致谢 夏建白教授报告他们的理论研究成果, 给作者以启示来提出本工作的构思, 后来又与作者进行了有益的讨论, 我们表示深深感谢.

参 考 文 献

- [1] J. B. Xia, Phys. Rev., 1988, **B38**:8358.
- [2] J. Ihm, Appl. Phys. Lett., 1987, **50**:1068.
- [3] L. Brey and C. Tejedor, Phys. Rev., 1987, **B35**:9112.
- [4] Y. T. Lu and L. J. Sham, Phys. Rev., 1989, **B40**:5567.
- [5] H. Fujimoto, C. Hamaguchi, T. Nakazawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 1989, **58**:3727.
- [6] D. Z. -Y. Ting and Y. C. Chang, Phys. Rev., 1987, **B36**:4357.
- [7] J. B. Xia and Y. C. Chang, Phys. Rev., 1990, **B42**:1781.
- [8] K. B. Kahen and J. P. Leburton Phys. Rev., 1986, **B33**:5465.
- [9] Y. C. Chang, J. N. Schulman and U. Efron, J. Appl. Phys., 1987, **62**:4533.

- [10] M. Garriga, M. Cardona, N. E. Christensen *et al.*, Phys. Rev., 1987, **B36**:3254.
[11] L. Y. Chen, X. W. Feng, Y. Su *et al.*, Thin Solid Films, 1993, **234**:385.
[12] 莫党, 陈树光, 余玉贞等, 物理学报, 1980, **29**:673.
[13] 何星飞, 莫党, 物理学报, 1986, **35**:1567.
[14] W. Hanke and L. J. SHam, Phys. Rev., 1980, **B21**:4656.

Experimental Verification of Theoretical Calculation of Dielectric Function Spectra of Short-Period GaAs/AlAs Superlattices

Mo Dang and Tan Jianhua

(Department of physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275 and
National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Beijing 100083)

Chen Zonggui, Yang Xiaoping, Zhang Penghua and Zhang Wei

(National Laboratory for Superlattices and Microstructures,
Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)

Chen Liangyao

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433)

Received 20 September 1994

Abstract Ellipsometric spectra of a series of short-period $(\text{GaAs})_M/(\text{AlAs})_M$ superlattices with $M=2, 4, 6, 10$ have been measured. The dielectric function spectra of these samples are directly analysed and compared with the theoretical results for the superlattices with $M=4, 6, 10$ calculated by Jian-Bai Xia and Yia-Chung Chang. The main features of the experimental spectra near the E_1 and \tilde{E}_1 peaks in the 3.5–4.5eV range are consistent with results of theoretical calculation. The \tilde{E}_1 peaks in the measured spectra are stronger than those in the theoretical results, and the difference of \tilde{E}_1 peak between superlattices of different M is also larger for the experimental results.

PACC: 6865, 7865, 7360, 0760F