

MBE $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层量子阱的 光调制反射光谱

池坚刚¹⁾ 赵文琴 李爱珍²⁾

中国科学院上海技术物理研究所红外物理开放研究实验室

1988 年 9 月 5 日收到

本文采用光调制反射光谱技术研究了 MBE $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层量子阱。通过实验分析和理论上对受应力作用后能带结构的估算, 确认在这一系统中流体静压力作用引起的能带结构变化主要出现在导带上, 同时也证实了 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层量子阱属于第 II 型量子阱结构。实验结果与理论估算符合很好。

一、引 言

$\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 作为很有希望的 1.0—1.7 μm 波段光电器件的半导体材料, 目前已引起了人们广泛的注意。最近^[1]已报道了 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层超晶格发光二极管, 但至今没有看到有关 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层超晶格和量子阱材料性质研究的报道。本文采用光调制反射光谱技术研究 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层量子阱的能带结构及有关信息。

二、实验与结果

样品由分子束外延方法生长。对多量子阱结构的 CL45 样品, 先在 (100) GaAs 衬底上生长约 $2\mu\text{m}$ $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 缓冲层, 再在缓冲层上生长 25 个周期的 $\text{GaAs}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}/\text{GaAs}$ 多量子阱。TEM 测得 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 层和 GaAs 层的厚度分别为 119.35 Å 和 358.05 Å, 并且表明量子阱具有较好的晶格结构。而 CL42 样品, 在 (100) GaAs 衬底上生长约 7600 Å $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 缓冲层, 再依次生长 320 Å GaAs, 40 Å $\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$, 320 Å GaAs, 80 Å $\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$, 320 Å GaAs, 120 Å $\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$, 320 Å GaAs, 最后生长约 760 Å GaAs 覆盖层。

光调制反射光谱 (PR) 实验采用 1mW He-Ne 激光器的 6328 Å 线作为调制光源 (频率为 320Hz), 100W 溴钨灯为探测光, 信号用 Si 二极管接收, 整个系统由计算机控制。

图 1(a), (b) 分别为 CL45 和 CL42 样品在 1.1—1.5eV 能量范围内进行多次扫描后获得的室温 PR 谱。由于这波段范围内 PR 谱对样品的探测深度约 $1\mu\text{m}$ ^[2], 那么在 CL45

1) 宁波师范学院物理系。

2) 中国科学院上海冶金研究所。

样品中的 PR 信息只反映量子阱的情况。从图 1(a) 可见, PR 谱主要由两个部分组成(在图上用 A, B 标出)。对 1.4eV 左右的 A 结构,从它的能量位置和量子阱结构分析,它应为量子阱中 GaAs 层的 E_0 跃迁,根据“三点法”计算得到它的跃迁能量为 1.387 eV(图

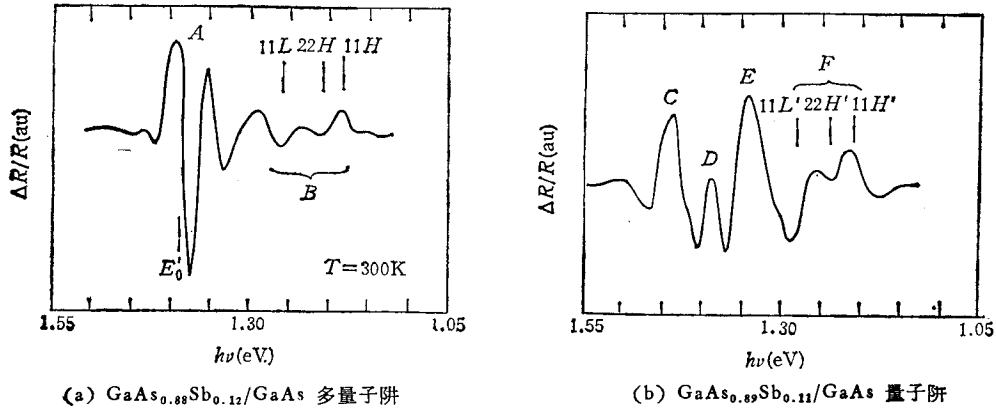


图 1 室温下 GaAs_{1-x}Sb_x/GaAs 应变层量子阱的 PR 谱

1 中用 E'_0 标记),比体材料 GaAs 的 E_0 (1.424eV) 小。而 1.1—1.28eV 范围的 B 结构,它含有几个跃迁,是量子阱中子带间的跃迁。图中 $mnH(L)$ 标记第 m 个重空穴(轻重穴)子带到第 n 个电子子带间的跃迁。

对 CL42 样品,若考虑到与 CL45 样品的差别,可知 D 结构与 A 结构对应,为量子阱中 GaAs 层 E_0 跃迁,跃迁能量为 1.391eV; 而 F 结构(与 B 对应)也含有几个跃迁,显然为量子阱中子带间跃迁;而在 1.42eV 的 C 结构是来自覆盖层 GaAs 的 E_0 跃迁,由于覆盖层中没有应力作用,它的跃迁能量不变;如果注意到 PR 谱的穿透深度和 CL42 中量子阱和覆盖层的总厚度($\sim 0.25 \mu\text{m}$),就不难解释 E 结构信号是来自缓冲层 GaAs_{1-x}Sb_x 的平均效应。

最近的研究表明^[3],在弱电场条件下,超晶格和量子阱的 PR 谱可表为

$$\Delta R/R = \text{Re} \left[\sum_{j=1}^p c_j e^{i\theta_j} (E - E_{g,j} + i\Gamma_j)^{-1} \right]. \quad (1)$$

其中 E 为光子能量, p 为临界点的个数, c_j , θ_j , $E_{g,j}$ 和 Γ_j 为第 j 个结构的振幅、相角、临界点能量和展宽参数。

采用(1)式,对 CL45 的 B 结构和 CL42 的 F 结构进行拟合计算,结果发现它们均由三个子带间的跃迁组成。各子带间的跃迁能量和展宽参数列于表 1 中。图 2(a), (b) 分别表示拟合曲线与实验值的比较。

表 1

样品	CL45			CL42		
	11H	22H	11L	11H'	22H'	11L'
光谱结构	11H	22H	11L	11H'	22H'	11L'
能量位置 (eV)	1.183	1.212	1.260	1.208	1.236	1.280
展宽参数 (meV)	9.0	12.5	9.0	22.3	17.0	13.7

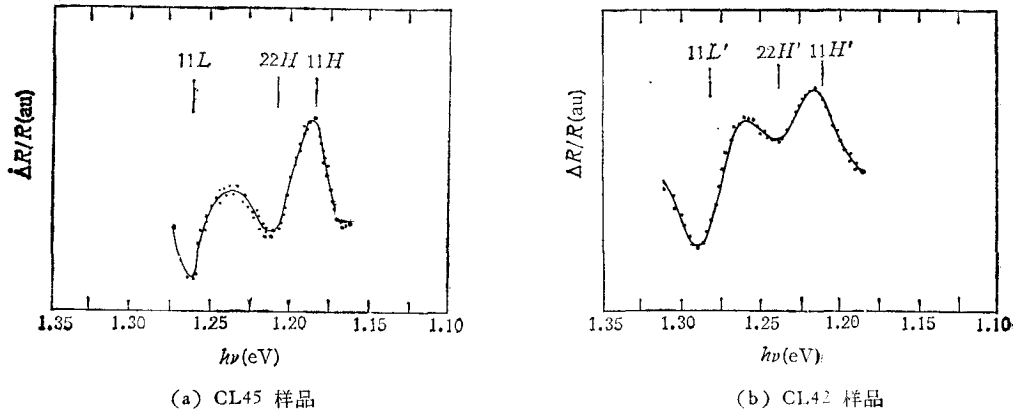


图2 GaAs_{1-x}Sb_x/GaAs 量子阱 PR 谱的实验值(点线)和拟合曲线(实线)

三、理论计算

在应变层量子阱中,虽然 GaAs_{1-x}Sb_x 和 GaAs 的晶格常数失配,但它们可弹性地调整相互之间的原子间距,使它们都达到一个适中的晶格常数 a'' ^[4]

$$a''(h_1 + h_2) = a_1 h_1 + a_2 h_2. \quad (2)$$

a_i , h_i ($i = 1, 2$) 分别为 GaAs 层和 GaAs_{1-x}Sb_x 层未受到形变时的晶格常数和层厚. 此时,在生长平面内 GaAs_{1-x}Sb_x 将受到压应力作用,而 GaAs 则受到张应力作用. 若设生长平面 (x, y) 内的应力为 σ , 则

$$\sigma_i = (a'' - a_i)/a_i. \quad (3)$$

σ_i ($i = 1, 2$) 分别表示 GaAs 和 GaAs_{1-x}Sb_x 层的张应力 ($\sigma > 0$) 和压应力 ($\sigma < 0$).

在这种形变晶体中,可认为受到一个流体静压力和一个沿垂直生长平面方向的单轴应力作用^[5]. 这应力将会使形变层晶体的能带结构发生变化. 显然,前者使得能隙发生变化,而后者将使重空穴带和轻空穴带发生分裂,再次导致能隙改变. 一般情况下,单轴应力和流体静压力作用下的哈密顿量可写成^[6,7]

$$H_{\text{Strain}} = -(a' - a'')(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) - 3b[(L_x^2 - \frac{1}{3}L^2)e_{xx} + cp] + 3d[(L_x L_y + L_y L_x)e_{xy} + cp]. \quad (4)$$

其中 e_{ij} ($i, j = x, y, z$) 为应力张量分量, L 为角动量算符, cp 相应 x, y, z 循环置换符号, $a' - a''$ 代表由于流体静压力引起的导带和价带的移动, b 为四角形变势, d 为三角形变势.

在这里,各应力张量分量可写成^[8]

$$e_{xx} = e_{yy} = \sigma, \quad e_{zz} = -K\sigma, \quad e_{xy} = e_{yz} = e_{zx} = 0. \quad (5)$$

其中 $K = -\frac{2S_{12}}{S_{11} + S_{12}}$, S_{ij} 为弹性常数. 于是(4)式可改写为

$$H_{\text{Strain}} = -(a' - a'')(2 - K)\sigma + 3b(1 + K)\sigma \left(L_x^2 - \frac{1}{3}L^2 \right). \quad (6)$$

采用 (J, M_J) 表象中的价带波函数^[6,9](单轴应力沿 [001] 方向) 为基, 可把 (6) 式写成矩阵形式

$$H_{i,j} = \begin{matrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle & \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \begin{pmatrix} -E_H - E_S & 0 & 0 \\ 0 & -E_H + E_S & \sqrt{2} E_S \\ 0 & \sqrt{2} E_S & -E_H - \Delta_0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (7)$$

Δ_0 为自旋-轨道分裂.

$$\begin{aligned} E_H &= (a^c - a^v)(2 - K)\sigma, \\ E_S &= b(1 + K)\sigma. \end{aligned} \quad (8)$$

解 (9) 式的久期方程, 得到重空穴、轻空穴带和自旋-轨道耦合带到导带的跃迁能量变化.

$$\begin{aligned} \Delta E_{Hc} &= E_H + E_S, \\ \Delta E_{Lc} &= E_H + \frac{\Delta_0}{2} - \frac{E_S}{2} - \frac{1}{2} (\Delta_0^2 + 2\Delta_0 E_S + 9E_S^2)^{1/2}, \\ \Delta E_{\Delta_0c} &= E_H + \frac{\Delta_0}{2} - \frac{E_S}{2} + \frac{1}{2} (\Delta_0^2 + 2\Delta_0 E_S + 9E_S^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (9)$$

在本文 $\Delta_0 \gg E_S$, 上式可近似写为

$$\begin{aligned} \Delta E_{Hc} &= E_H + E_S, \\ \Delta E_{Lc} &= E_H - E_S, \\ \Delta E_{\Delta_0c} &= E_H + \Delta_0. \end{aligned} \quad (10)$$

表 2 列出了采用 (2)~(10) 式对 CL45 样品的计算结果. 在计算中, 我们假定 GaAs_{1-x}Sb_x 的参数采用 GaAs 和 GaSb 参数的权重平均值^[4], 一些参数如表 3 所示.

表 2

	$a^v(\text{\AA})$	σ	$E_g(\text{eV})$	$E_H(\text{meV})$	$E_S(\text{meV})$
GaAs _{0.88} Sb _{0.12}	5.6673	-0.69%	1.211	67.3	-26.0
GaAs	5.6673	0.234%	1.424	-22.9	8.7

表 3

	$S_{11}(\text{Pa}^{-1})$	$S_{12}(\text{Pa}^{-1})$	$a^c - a^v(\text{eV})$	$b(\text{eV})$
GaAs	$1.175 \times 10^{-11}[12]$	$-0.365 \times 10^{-11}[12]$	-8.9 ^[13]	1.96 ^[13]
GaSb	$1.584 \times 10^{-11}[12]$	$-0.496 \times 10^{-11}[12]$	-8.27 ^[14]	2.0*

* 对于 GaSb, $dE/dP = 3a(S_{11} + 2S_{12})$, $dE/dP = 14.7 \times 10^{-6} \text{eV/bar}$.

现在再来讨论 GaAs_{1-x}Sb_x/GaAs 量子阱的带边能带结构. 先不考虑应力效应, 根据 GaAs 和 GaSb 的电子亲和势^[11] ($\chi_{\text{GaAs}} = 4.07 \text{eV}$ 和 $\chi_{\text{GaSb}} = 4.06 \text{eV}$), 我们认为 GaAs_{0.88}Sb_{0.12} 的电子亲和势 $\chi_{\text{GaAs}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}} = 4.069 \text{eV}$ (GaAs 和 GaSb 的权重平均值). 于

是 $\text{GaAs}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}/\text{GaAs}$ 量子阱的带边能带结构如图 3(a) 所示。从电子亲和势可看到, $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 和 GaAs 导带几乎是连续的 (只差几个 meV), 只有空穴被限制在 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 中。如果考虑到应力使得带边能带的变化, 并且认为流体静压力作用的能量变化 E_H 主要 ($\sim 80\%$) 分配在导带上^[10], 那么有应力作用的 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层多量子阱的能带结构如图 3(b)。可见, $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层多量子阱是属于第 II 型组份量子阱结构。在量子阱中, 空穴、电子的能级可根据孤量子阱近似来估算^[19]。

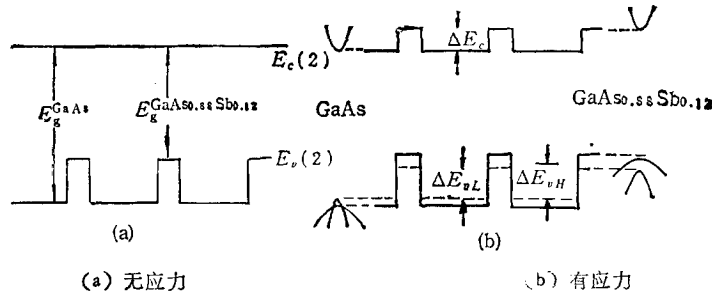


图 3 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 量子阱的带边能带结构

但从以上分析可知, 由于 E_H 出现在导带和价带的比例不确定, 仍然无法获得各子带间的跃迁能量 (第 I 型量子阱不存在这问题), 因此, 把它作为一个可调参数, 通过与实验值比较来确定。若 $83\% E_H$ 出现在导带上, CL45 样品的实验值与理论值符合很好。结果列于表 4 中。表 4 中也列出了 E_0 的理论值。

表 4

(单位: eV)

	11H	22H	11L	$\text{GaAs}; E_0$
理论值	1.185	1.210	1.257	1.392
实验值	1.183	1.212	1.260	1.387

四、讨 论

对于 CL45 样品, 由于量子阱中 GaAs 层受到张应力 ($\sigma > 0$) 作用, 它的能隙减小, 此时价带顶是轻空穴带而不再是重空穴带, 因此 E_0 跃迁是轻空穴带到导带的跃迁, 并且跃迁能量红移。从图 3 可知, 在 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 量子阱中, 由于 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 受压应力作用, 能隙增大, GaAs 层受张应力作用, 能隙减小, 从而构成了第 II 型量子阱结构, 对 $x = 0.12$, 导带和价带的不连续值分别为 $\Delta E_c = 75\text{meV}$, $\Delta E_{vH} = 232\text{meV}$, $\Delta E_{vL} = 163\text{meV}$ 。虽然 GaAs 层的价带顶为轻空穴带, 但 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 层的价带顶仍为重空穴带 ($\sigma < 0$), 因此, PR 谱上对应的最低能量结构是 11H 跃迁, 同样, 与理论值比较, 另两个结构为 22H, 11L 跃迁。值得注意的是 $\text{GaAs}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ 体材料的禁带宽度为 1.211eV , 而 11H 跃迁的能量为 1.185eV , 前者比后者大 25meV 。显然这是第 II 型量子阱结构的特点。

CL42 样品在覆盖层和缓冲层之间包含有三个不同阱宽($\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$ 层)的量子阱. 因为各量子阱的宽度不一样, 不能再利用(2)式来计算 a'' , 这样就无法获得量子阱中各层的应力. PR 实验表明, F 结构也由三个子带间的跃迁组成, 与 CL45 相似, 我们认为 F 结构是来自某一个平均阱宽 ($\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$ 层)量子阱中的子带间的跃迁. 这平均效应也在含有五个单量子阱的 PR 谱上观察到.

从 CL42 样品的生长结构看, 对于 40 \AA 的 $\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$ 层, 第一, 由于靠近缓冲层, 可能有较多的位错缺陷深入; 第二, 这层厚度薄, 受到的应力比另外两层 $\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$ 要大, 产生 PR 谱信号比较弱; 第三, 即使这层产生 PR 谱信号, 也要被上面两个量子阱所削弱, 因此, 40 \AA 层的量子阱在 PR 谱上出现的信号将会十分微弱, 可不加考虑. 而对于 80 \AA , 120 \AA $\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.12}$ 层的量子阱, 由于两者厚度比较相近, 两者受到应力 (GaAs 层的厚度一样)和量子尺寸效应也相近, 这样就可以认为 CL42 的 PR 谱 F 结构是来自这两个量子阱的平均效应. 若假定平均阱宽为 100 \AA ($\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$ 层, 80 \AA 和 120 \AA 的平均值), GaAs 层仍为 320 \AA , 那么按上述理论, 可获得如表 5 和表 6 所示的结果. 可见在此假定下获得的理论值基本上与实验值符合. 在图 1(b), 图 2(b) 中用 $11H'$, $22H'$, $11L'$ 表示这平均效应量子阱的子带间跃迁.

表 5

	$a''(\text{\AA})$	$\bar{\epsilon}$	$E_0(\text{eV})$	$\bar{E}_{II}(\text{meV})$	$\bar{E}_S(\text{meV})$
$\text{GaAs}_{0.89}\text{Sb}_{0.11}$	5.6655	-0.64%	1.227	62.8	-24.2
GaAs	5.6655	0.203%	1.424	-20.0	7.6

表 6

	$11H'$	$22H'$	$11L'$	$\text{GaAs}; E_0$
理论值	1.208	1.241	1.284	1.396
实验值	1.208	1.236	1.280	1.391

比较表 1 中两个样品的拟合计算结果, 发现这种平均效应量子阱结构的展宽参数比多量子阱的要大得多(相同的实验条件). 这一方面可能用这种方法生长出的几个单量子阱, 由于各量子阱之间应力不同, 存在较多的缺陷, 影响了晶格的完整性; 另一方面可能由于各量子阱的量子尺寸效应不同, 子带间的能级存在一定的差别, 引起 PR 谱上的谱峰展宽.

五、结 语

通过对 $\text{GaAs}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}/\text{GaAs}$ 应变层多量子阱的 PR 谱研究和应力作用下 GaAs 和 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ 体材料能带变化的估算, 结合它们的电子亲合势, 确定 $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ 应变层多量子阱属第 II 型量子阱结构. 在这个系统中, 流体静压力作用引起的能带变化主

要($\sim 83\%$)出现在导带上。对于含有几个不同阱宽的量子阱结构,在 PR 谱上只能观察到平均效应,这种平均阱宽与量子阱本身的生长结构有关。

- [1] J. Klem *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **55**(1984), 3843.
- [2] F. H. Pollak, private communication.
- [3] Y. S. Tang, D. H. Jiang & K. Ploog, *Solid State Commun.*, **64**(1987), 655.
- [4] G. C. Osbourn, *J. Appl. Phys.*, **53**(1982), 1586.
- [5] G. C. Osbourn, *IEEE J. Quan. Electron.*, **QE-22**(1986), 1677.
- [6] L. D. Laude, F. H. Pollak & M. Cardona, *Phys. Rev.* **B3**(1971), 2623.
- [7] M. Chandrasekher & F. H. Pollak, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 2127.
- [8] M. Nakayama *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **58**(1985), 4342.
- [9] E. O. Kane, in "Semiconductors and Semimetals" ed. by R. K. Willardson & A. C. Beer, Vol. 3 (1967), p. 75.
- [10] P. L. Gourley & R. M. Biefeld, *Appl. Phys. Lett.*, **45**(1984), 749.
- [11] G. A. Sai-Halasz, R. Tsu & L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.*, **45**(1984), 749.
- [12] F. Cerdeira *et al.*, *Phys. Rev.*, **B5**(1972), 580.
- [13] R. N. Barghara *et al.*, *Phys. Rev.*, **161**(1967), 695.
- [14] C. Benoit *et al.*, *J. Phys. Chem. Solid*, **31**(1970), 417.
- [15] K. Ploog & G. H. Bohler, *Advance in Physics*, Vol. 32(1983), 286.

PHOTOREFLECTANCE SPECTROSCOPY OF MBE $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ STRAINED LAYER QUANTUM WELL

CHI JIAN-GANG ZHAO WEN-QIN LI AI-ZHEN

Laboratory of Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica

(Received 5 September 1988)

ABSTRACT

The MBE $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ strained layer quantum well has been investigated by means of photoreflectance measurement. The energy band structure has been estimated by theoretical fitting with the experimental results. We confirmed that the variations of band structure caused by hydrostatic component of the strain mainly exist in conduction band, and that MBE $\text{GaAs}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaAs}$ strained layer quantum well is a typical one of type II. The theoretical estimation coincide well with our experimental results.