

GaAs/Al_xGa_{1-x}As 超晶格子带间 光跃迁的研究

潘少华 陈正豪 冯思民 崔大复 杨国楨¹⁾

中国科学院物理研究所, 北京, 100080

1990 年 2 月 26 日收到

运用 Kronig-Penney 模型的新形式, 研究了超晶格子带间光跃迁的频率、带宽和跃迁强度. 用 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 多量子阱材料做了关于红外吸收的实验, 理论与实验符合较好.

PACC: 7830; 7125T

一、引 言

随着分子束外延等技术的不断完善, 半导体超晶格的制备、研究和应用受到日益广泛的重视. 迄今研究得最多的是 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 材料. 超晶格是由两种材料薄层交替生长而成, 由窄带隙材料 (例如 GaAs) 构成电子和空穴的势阱, 而由宽带隙材料 (Al_xGa_{1-x}As), 构成势垒, 图 1 给出电子的势能曲线, 它接近于周期方阱, 即 Kronig-Penney 模型^[1].

超晶格的波函数, 可视为原子晶格布洛赫波函数同包络波函数之乘积, 后者来源于沿量子阱生长方向的量子限制效应和超周期性 (super-periodicity). 由于这两种效应, 体材料的每个布里渊区被划分成许多个微布里渊区. 相应地, 每条能带被划分成许多条子能带. 当电子在子能带间发生光致跃迁时, 布洛赫波函数保持不变, 只改变包络波函数.

近年来的理论和实验研究表明^[2], 这种超晶格包络波函数态之间的跃迁具有很大的电偶极矩强度和窄的带宽, 其中心波长落在中红外范围 ($\lambda \approx 10\mu\text{m}$ 左右, 对应于大气传输窗口), 同时具有波长可随材料参数调节, 材料制作上易于集成化等优点, 因此具有很大的应用前景, 例如制作红外探测器等.

最近 Cho 和 Prucnal 推导出周期势阱中子能带带端 ($kd = 0$ 和 π) 的包络波函数和能量本征值^[3]. 我们发展了他们的工作, 给出任意超晶格波矢值 k 的包络波函数和

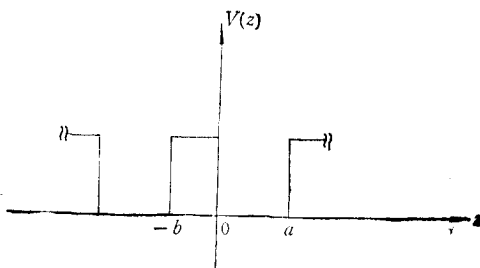


图 1 超晶格的周期方阱

¹⁾ 中国高等科学技术中心(世界实验室).

能量本征值^[4]。这显然为子带间包络态间光跃迁研究提供了更全面、更坚实的理论基础,即不仅能求出子带间光吸收峰所对应的频率和偶极跃迁矩,而且能估计由于隧穿效应所造成的带宽。本文在文献[4]的基础上,首先给出光跃迁公式,然后以 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 材料为例给出计算、分析及与实验的比较。

二、理 论

1. 包络波函数和能量本征值

根据周期方势阱(图1)中电子态所满足的薛定谔方程,包络波函数 ϕ_j 在阱内部分可表示成 $\cos \alpha(z - a/2)$ 和 $\sin \alpha(z - a/2)$ 的线性组合,垒上部分为 $\text{ch} \delta(z + b/2)$ 和 $\text{sh} \delta(z + b/2)$ 的线性组合,下标 j 为带指标,

$$\phi_j(z) = \begin{cases} A_j \cos \alpha(z - a/2) + B_j \sin \alpha(z - a/2) & 0 \leq z \leq a; \\ C_j \text{ch} \delta(z + b/2) + D_j \text{sh} \delta(z + b/2) & -b \leq z \leq 0, \end{cases} \quad (1)$$

$$\text{式中} \quad \alpha = (2m_a E)^{1/2}/\hbar, \quad (2)$$

$$\delta = [2m_b(V - E)]^{1/2}/\hbar, \quad (3)$$

$m_a(m_b)$ 表示阱(垒)材料电子有效质量, E 为电子能量。

(1)式的波函数,在势阱与势垒的交界处,要满足 Bastard 边界条件^[5]: ϕ_j 和 $(1/m^*) (\partial \phi_j / \partial z)$ 在 $z = 0$ 点连续。运用此条件以及超晶格布洛赫定理,可以定出(1)式的系数 A_j 到 D_j , 以及能带方程。定义比值

$$\gamma = m_a \delta / m_b \alpha. \quad (4)$$

奇、偶数子能带的方程可合并表述如下:

$$\gamma_j = \frac{\cos kd - \cos \alpha a \text{ch} \delta b - (-1)^j \sqrt{[(\text{ch} \delta b - \cos kd \cos \alpha a)^2 - \sin^2 kd \sin^2 \alpha a]}}{\sin \alpha a \text{sh} \delta b}. \quad (5)$$

这里特意给 γ 添加下标 j , 即对于奇数子能带 ($j = 1, 3, 5, \dots$), 上式的根式前有加号; 反之对于偶数子能带 ($j = 2, 4, 6, \dots$), 根式前有减号。(1)式中势垒波函数的系数如下:

$$C_j = \phi_0 \left(\text{ch} \frac{\delta b}{2} - P_j \text{sh} \frac{\delta b}{2} \right), \quad D_j = \phi_0 \left(P_j \text{ch} \frac{\delta b}{2} - \text{sh} \frac{\delta b}{2} \right), \quad (6)$$

式中

$$P_j = \frac{\text{ch} \delta b e^{i k d} - \cos \alpha a}{\gamma_j \sin \alpha a + \text{sh} \delta b e^{i k d}}. \quad (7)$$

关于势阱波函数的系数,则按奇数和偶数子能带,分别具有不同形式,

$$A_j = \begin{cases} \left(\phi_0 / \cos \frac{\alpha a}{2} \right) \left[1 + \frac{1}{2} \sin \alpha a (R_j + i I_j) \right] & j = 1, 3, 5, \dots; \\ \phi_0 \sin \frac{\alpha a}{2} (R_j + i I_j) & j = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (8a)$$

$$B_j = \begin{cases} \phi_0 \cos \frac{\alpha a}{2} (R_j + iI_j) & j = 1, 3, 5, \dots; \\ \left(-\phi_0 / \sin \frac{\alpha a}{2} \right) \left[1 - \frac{1}{2} \sin \alpha a (R_j + iI_j) \right] & j = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (8b)$$

式中虚部量

$$I_j = \gamma_j \frac{\sin kd(\gamma_j \sin \alpha a \operatorname{ch} \delta b + \cos \alpha a \operatorname{sh} \delta b)}{(\operatorname{sh} \delta b \cos kd + \gamma_j \sin \alpha a)^2 + (\operatorname{sh} \delta b \sin kd)^2}, \quad (9)$$

实部量 R_j 与 I_j 有如下关系:

$$R_j = (-1)^j (1 - \sqrt{1 - I_j^2 \sin^2 \alpha a}) / \sin \alpha a. \quad (10)$$

(7)和(8a), (8b)式中的 ϕ_0 由波函数的归一化条件求出.

以上给出奇、偶数子能带的能带方程,以及关于包络波函数的解析表达式. 得到这些结果的推导过程,以及对它们的分析见文献[4]. 总之,联立(2)–(5)式,可以求得奇、偶数子能带中任意超晶格波矢值 k 的能量本征值 E , 而由(1)式及其相应的系数表达式(6)至(10)和关于 ϕ_0 的归一化条件,可以得到奇、偶数子能带中任意 k 值的包络波函数 ϕ_j . 这些是研究子带间光跃迁的理论基础.

2. 子带间光跃迁的理论

在有效质量近似下,超晶格波函数可视为体材料布洛赫函数和慢变的包络波函数之乘积^[5],对于我们的情形,它可表为

$$\Psi(\mathbf{r}) = A^{-1/2} U(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t) \phi(z), \quad (11)$$

式中 $\mathbf{k}_t$ 和 $\mathbf{r}_t$ 分别表示横向(即垂直于量子阱生长方向)的波矢和坐标矢量; A 为横向截面积; $U(\mathbf{r})$ 为在导带底附近,体材料原胞周期函数. $\phi(z)$ 即为第1节中所述的包络波函数,由超晶格布洛赫原理: $\phi(z) = e^{ik_z z} u(z)$ ($u(z)$ 为超晶格周期函数),在 $-b \leq z \leq a$ (第0个周期)之外, $\phi(z)$ 可表为 $e^{in\pi z/a} \phi_j(z)$ (当 $-b + nd \leq z \leq a + nd$). 当运用(11)式计算 Ψ 至 Ψ' 态间的偶极跃迁矩时,应注意到关于波矢的选择定则

$$\mathbf{k}_t = \mathbf{k}'_t, \quad k_z = k'_z. \quad (12)$$

(12)式成立的条件为:晶格电子的动量远大于光子的动量. 由于 $k_t \approx 1/a_0$ (a_0 为体材料晶格常数,为 $5\text{--}6 \text{ \AA}$), $k_z \approx 1/d$ (d 为超晶格周期,即势阱宽 a 与势垒宽 b 之和,为 $100\text{--}200 \text{ \AA}$), 而中红外光子的波矢 $q \approx 1/\lambda$ (λ 为波长,为 $5\text{--}10 \text{ \mu m}$), 故确能满足条件 $k_t \gg q$ 和 $k_z \gg q$, 使(12)式成立. 此外,在发生子带间光跃迁时,体原胞函数 $U(\mathbf{r})$ 可以认为保持不变. 运用第1节(1)式关于包络波函数以及相应的系数表达式,并结合上述几点,求得从 $\Psi(\mathbf{r})$ 至 $\Psi'(\mathbf{r})$ 态的偶极跃迁矩如下:

$$\langle \Psi'(\mathbf{r}) | e\mathbf{z} | \Psi(\mathbf{r}) \rangle = e z_{j'j} \delta_{\mathbf{k}'_t, \mathbf{k}_t} \delta_{k'_z, k_z}, \quad (13)$$

式中 $z_{j'j}$ 表示从第 j 子带中波矢为 k 的包络态到第 j' 子带 k' 态的偶极矩阵元,它的形式为

$$z_{j'j} = \frac{B_{j'}^* A_j + B_j A_{j'}^*}{(\alpha_j + \alpha_{j'})^2} \left[\sin \frac{(\alpha_j + \alpha_{j'})a}{2} - \frac{(\alpha_j + \alpha_{j'})a}{2} \cos \frac{(\alpha_j + \alpha_{j'})a}{2} \right] \\ + \frac{B_{j'}^* A_j - B_j A_{j'}^*}{(\alpha_{j'} - \alpha_j)^2} \left[\sin \frac{(\alpha_{j'} - \alpha_j)a}{2} - \frac{(\alpha_{j'} - \alpha_j)a}{2} \cos \frac{(\alpha_{j'} - \alpha_j)a}{2} \right]$$

$$+ \frac{D_{j'}^* C_j + D_j C_{j'}^*}{(\delta_j + \delta_{j'})^2} \left[\frac{(\delta_j + \delta_{j'})d}{2} - \frac{(\delta_j + \delta_{j'})a}{2} \operatorname{ch} \frac{(\delta_j + \delta_{j'})b}{2} - \operatorname{sh} \frac{(\delta_j + \delta_{j'})b}{2} \right] \\ + \frac{D_{j'}^* C_j - D_j C_{j'}^*}{(\delta_{j'} - \delta_j)^2} \left[\frac{(\delta_{j'} - \delta_j)d}{2} - \frac{(\delta_{j'} - \delta_j)a}{2} \operatorname{ch} \frac{(\delta_{j'} - \delta_j)b}{2} - \operatorname{sh} \frac{(\delta_{j'} - \delta_j)b}{2} \right]. \quad (14)$$

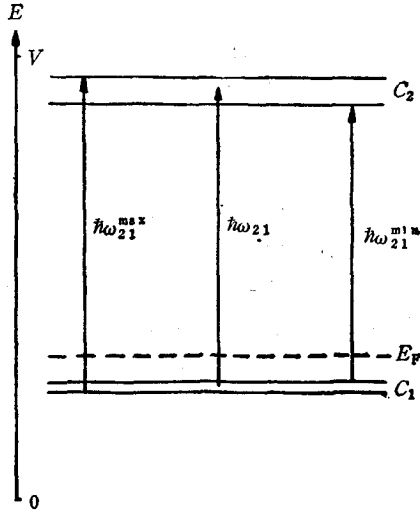


图2 子带间光跃迁示意图
(绘图尺寸不按比例, C_1 宽度被扩大) C_1, C_2 表示第一、二子能带; E_F 表示费密能级; $\hbar\omega_{21}^{\max}$ 和 $\hbar\omega_{21}^{\min}$ 分别对应于 $k=0$ 和 $k=\pi/d$;

$$\hbar\omega_{21} = \frac{1}{2} (\hbar\omega_{21}^{\max} + \hbar\omega_{21}^{\min})$$

在上式中, 给 α 和 δ 添加了表示子能带的下标 j 和 j' . α 和 δ 的值应由 (2) 至 (5) 式的联立方程组求出, 显然它们不仅同带指数 j 有关, 且依赖于超晶格波矢值, 故实应写成 $\alpha_j(k)$, $\delta_j(k)$ 和 $\alpha_{j'}(k')$, $\delta_{j'}(k')$. 但是从 (12) 或 (13) 式可见, k' 等于 k 时, (13) 式的跃迁矩才不为零, 所以只需要计算 j 子带 k 态到 j' 子带 k 态的矩阵元 $z_{j'j}$. 即首先在 (5) 式中指定一个 k 值, 然后联立 (2)–(5) 式求出 α_j 和 δ_j 以及 $\alpha_{j'}$ 和 $\delta_{j'}$ 值, 进而求出 (14) 式的 $z_{j'j}$, 它显然不仅同下标 j 和 j' 有关, 而且随 k 而变, 故应写成 $z_{j'j}(k)$.

根据半经典的密度矩阵方法, 采用与文献 [6] 类似的推导方法, 可以将子带间光跃迁的吸收系数 $A_{j'j}(\omega)$ 表示成

$$A_{j'j}(\omega) = \frac{2\omega e^2}{V} \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \sum_k \left\{ |z_{j'j}|^2 \sum_{k_t} \frac{(f_j - f_{j'}) (\hbar/\tau_{in})}{(E_{j'} - E_j - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \right\}, \quad (15)$$

式中 ω 为光波圆频率; μ , ϵ_R 和 V 分别表示超晶格材料的磁导率、介电常数的实部和体积; τ_{in} 为唯象地引入方程的子带内弛豫时间, 它由电子与声子间的碰撞等机制所决定; $E_j = E_j(k)$ 和 $E_{j'} = E_{j'}(k)$ 为第 1 节所决定的包络波函数态的能量; f_j 和 $f_{j'}$ 为对应于电子总能量的费密-狄喇克分布,

$$f_j = 1 / \left\{ 1 + \exp \left[\left(E_j + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_a} - E_F \right) / k_B T \right] \right\}; \quad (16a)$$

$$f_{j'} = 1 / \left\{ 1 + \exp \left[\left(E_{j'} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_a} - E_F \right) / k_B T \right] \right\}, \quad (16b)$$

式中含 k_t 的项为电子横向动能, E_F 为费密能, k_B 为玻耳兹曼常数, T 为温度. (15) 式对 k_t 的求和不难化成积分而求出^[6], 使 (15) 式化为

$$A_{j'j}(\omega) = \omega e^2 \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_R}} \left(\frac{m_a k_B T}{L \pi \hbar^2} \right) \sum_k \frac{|z_{j'j}|^2 (\hbar/\tau_{in})}{(E_{j'} - E_j - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \\ \cdot \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E_j)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_{j'})/k_B T]} \right\}, \quad (17)$$

式中 $L = Nd$ 为样品在 z 方向的尺度, N 为超晶格周期数. (17) 式中超晶格波矢 k 的求

和范围为 $0 \leq |k| \leq \pi/d$, k 的间隔为 $\Delta k = 2\pi/Nd = 2\pi/L$ 。显然包络态之间的跃迁频率与 k 值有关, 即 $\hbar\omega_{ji}(k) = E_j(k) - E_i(k)$ 。以 C_1-C_2 (第一子带到第二子带跃迁) 为例, 最大和最小跃迁频率分别为 $\hbar\omega_{21}^{\max} = E_{2t} - E_{1b}$ 和 $\hbar\omega_{21}^{\min} = E_{2b} - E_{1t}$, 如图 2 所示。这里下标 2t 和 1b 分别表示 C_2 顶和 C_1 底, 它们都对应于 $k = 0$; 2b 和 1t 分别表示 C_2 底和 C_1 顶, 都对应于 $k = \pi/d$ 。图 2 中 $\hbar\omega_{21}$ 表示 C_1-C_2 的中心频率, 定义为 $\hbar\omega_{21} \equiv \hbar(\omega_{21}^{\max} + \omega_{21}^{\min})/2$ 。(17)式中 E_F 决定于掺杂浓度, 在通常掺杂浓度下, 代表布居数差的因数 $\ln\{\dots\}$ 几乎是与 k 无关的常数。而在 $k = 0$ 至 $k = \pi/d$ 的整个范围内 $|z_{21}|^2$ 的变化也是很小的 ($< 20\%$)。因此将 $\delta E = \hbar(\omega_{21}^{\max} - \omega_{21}^{\min})$ 定义为隧穿谱宽, 它可以化成 $\delta E = (E_{2t} - E_{1b}) - (E_{2b} - E_{1t}) = (E_{2t} - E_{2b}) + (E_{1t} - E_{1b})$, 即

$$\delta E = \Delta E_2 + \Delta E_1. \quad (18)$$

当 $\delta E \gg \hbar/\tau_{ia}$ 时, 可由 δE 代表理论谱宽。唯象引入量 $1/\tau_{ia}$ 不能由本文理论给出, 关于 τ_{ia} 的报道值相当分散, 而且因样品而有数量级上之差异^[6,7]。故本文仅着重研究 $\hbar\omega_{21}$ 及其相应的 z_{21} , 以及 δE 随材料参量的变化规律。

三、实际举例

上节理论普遍适用于由两种材料薄层交替生长而成的超晶格, 即所谓组分型超晶格, 因为这种超晶格的电子势能曲线是接近于 Kronig-Penney 模型的^[8]。本节以这种超晶格的最典型, 也是最常用的材料 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 为例进行数值计算。GaAs/Al_xGa_{1-x}As 的势垒高度 V 由下式给出^[9]:

$$V = Q\Delta E_g, \quad \Delta E_g = 1266x + 260x^2 \text{ (meV)}, \quad (19)$$

式中 ΔE_g 为势垒材料 (Al_xGa_{1-x}As) 与势阱材料 (GaAs) 能隙值之差; Q 为能带偏置参量, 其值为 0.6; x 为 Al 的成分比。

根据上节理论计算出的吸收谱有关量与材料参数的关系列于表 1 至表 3。表中分别固定 a , b 和 x 中的二个, 而改变另一个, 它的取值范围使得在势垒高度 V 之下有两个完整的子能带, 因为从第一至第二这两个完整的束缚子能带间的光吸收谱是实验上最感兴趣的。例如, 根据上述取值原则, 表 1 取 a 在 65 至 105 Å 之间 (因为当 $b = 100$ Å, $x = 0.25$ 时, a 值低于此范围之下限时不足二个子带, a 值高于此范围之上限时则出现第三子带)。下面从物理机制方面, 对表 1 至表 3 的结果作出分析和说明。

表 1, b 和 x 固定, 变动势阱宽 a 。由此带来的主要变化为

1) $\hbar\omega_{21}$ 随 a 之增加而减小, 其原因是量子限制越宽, 德布罗意波长 λ 越长。对势垒为无限高的方势阱, $\lambda_n = 2a/n$, 能量 $E_n = (\hbar^2/2m^*)n^2(\pi/a)^2$, 故有 $\hbar\omega_{21} \approx a^{-2}$ 。表 1 表明, 由有限高势垒的周期方势阱形成的超晶格, 它的 C_1-C_2 之中心频率 $\hbar\omega_{21}$ 也随 a 之增大而减小, 但减小并不象 a^{-2} 那样迅速。在表 1 所给数据范围内, $\hbar\omega_{21}$ 大约随 a^{-1} 而下降。

2) δE 也随 a 之增加而减小。这是因为在 x , 因而 V 给定的条件下, 由于上述第(1)条规律, 子能带 C_2 与势垒顶之距离 ($V - E_2$) 随 a 之增大而变大, 致使电子通过势垒的隧穿概率减小, 因而子能带宽度 ΔE_2 随之减小, 导致 $\delta E (= \Delta E_2 + \Delta E_1)$ 随 a 之增大而

减小(基子带 C_1 的宽度 ΔE_1 也减小,但在表 1 至表 3 全部参量变化范围内, ΔE_1 是很小的,例如当 $a = 65 \text{ \AA}$, $b = 100 \text{ \AA}$, $x = 0.25$ 时, ΔE_2 为 12.17 meV , 而 ΔE_1 却只有 0.36 meV , 故在作物理分析时,为简单明瞭起见,忽略 C_1 的宽度)。

表 2, a 和 x 固定,变动势垒宽 b 。

1) 随着 b 之增加,一方面使量子限制效应增强,应使子能级间距增大,但同时由于隧穿减小使 C_2 的宽度 ΔE_2 变小,由于此二个因素是互相抵消的, C_1 — C_2 之中心频率 $\hbar\omega_{21}$ 受 b 之影响是小的。从表 2 第二行可见,当 $b \leq 120 \text{ \AA}$ 时,后一因素稍占优势,使 $\hbar\omega_{21}$ 随 b 之增加而略为下降,当 $b \geq 140 \text{ \AA}$ 时 $\hbar\omega_{21}$ 几乎不变。

表 1 吸收谱有关量随势阱宽 a 的变化 ($b = 100 \text{ \AA}$, $x = 0.25$)

$a(\text{\AA})$	65	70	75	80	85	90	95	100	105
$\hbar\omega(\text{meV})$	132	125	117	110	103	96	90	84	79
$\delta E(\text{meV})$	12.5	8.9	6.4	4.7	3.5	2.7	2.1	1.6	1.3
$z(\text{\AA})$	19.7	20.6	21.5	22.3	23.2	24.0	24.8	25.7	26.5

表 2 吸收谱有关量随势垒宽 b 的变化 ($a = 65 \text{ \AA}$, $x = 0.25$)

$b(\text{\AA})$	80	100	120	140	160	180	200	220	240
$\hbar\omega(\text{meV})$	134	132	132	131	131	131	131	131	131
$\delta E(\text{meV})$	21.0	12.5	7.8	5.0	3.3	2.2	1.5	1.0	0.7
$z(\text{\AA})$	19.5	19.7	19.7	19.7	19.6	19.6	19.6	19.5	19.5

表 3 吸收谱有关量随合金成分比 x 的变化 ($a = 65 \text{ \AA}$, $b = 100 \text{ \AA}$)

x	0.24	0.27	0.30	0.33	0.36	0.39	0.42	0.45	0.48
$\hbar\omega(\text{meV})$	129	139	148	156	163	169	174	179	184
$\delta E(\text{meV})$	14.1	9.8	6.5	4.2	2.7	1.7	1.0	0.6	0.4
$z(\text{\AA})$	19.8	19.4	19.0	18.6	18.3	18.0	17.8	17.5	17.3

2) 当 b 增大时,波函数的穿透概率迅速减小,因而 δE 随 b 之增加而变小的趋势是很显著的。

表 3, a 和 b 固定,变动合金成分比 x 。从(19)式可看出,势垒高度 V 随 x 的增加情况。

1) V 随 x 增加,使量子限制效应加强,另一方面又使 ΔE_2 变小,由于在表 3 所给参变量范围内,前一因素占主导故 $\hbar\omega_{21}$ 随 x 之增加而变大。但其影响不及因素 a (势阱宽),即 $|ad(\hbar\omega_{21})/da| > |xd(\hbar\omega_{21})/dx|$ (比较表 1 和表 2)。

2) 随着势垒之增高,波函数隧穿概率下降,子能带宽度减小。增大 x 时的这种效应是十分明显的,与改变 b 值对 δE 的作用相似。

总之,影响 $\hbar\omega_{21}$ 最大的因素是势阱宽 a ,而影响 δE 较大的因素则是合金成分比 x (决定势垒高 V) 和势垒宽 b 。至于跃迁矩 z_{21} , 受 a, b, x 三个因素之影响都是相当小

的(见表中第4行),这个性质对研制可调频的红外器件是有利的。

上面选择 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 材料参数(a, b, x)的一些常用数据,给出 C_1 — C_2 吸收谱有关量的 Kronig-Penney 模型的计算值(表1至表3)。由于 Kronig-Penney 模型接近于组分型超晶格的电子势能曲线^[8],故可期望表1至表3以及所作物理分析对实验和器件工作有一定参考价值。但另一方面又必须看到,真实的超晶格电子势能曲线往往是有弯曲的,并非严格的方阱。而且在制备多量子阱时,各个周期的势阱宽 a 和势垒宽 b 也往往难以掌握得很准确,这种厚度的非均匀性造成了跃迁频率的非均匀性,故实验吸收谱峰值所对应的 $\hbar\omega_{21}$ 情况是较复杂的。此外,这种跃迁频率的非均匀性也造成表观的附加谱宽。至于电子与声子碰撞等弛豫机制所造成的谱线增宽更是不可避免的。所以本文简化理论模型所给出的公式、实际例子以及物理分析,在应用于实际时,仅具有定性的或半定量的意义。

在实验上,用势阱宽为 $a = 65 \text{ \AA}$, 势垒宽为 $b = 100 \text{ \AA}$, Al 成分比为 $x = 0.25$, 周期数为 50, 势阱中心 $50 \text{ \AA}$ 掺 Si 浓度 $n = 1.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (对应于费密能 $E_F = 64 \text{ meV}$) 的样品 GaAs/Al_{0.25}Ga_{0.75}As, 用红外傅里叶光谱仪,在布鲁斯特角 ($\theta = 73^\circ$) 入射条件下,测得从第一至第二子带的吸收 $\mathcal{A}$ ($= -\log_{10} T$, T 为透射率)。详情见文献[10],这里仅列出与 $\mathcal{A}$ 有关的三个基本量:实测的吸收峰位置为 $\hbar\omega_{21} = 131 \text{ meV}$, $\mathcal{A}$ 的半高宽为 $\hbar\Delta\omega = 14.9 \text{ meV}$, 从积分吸收强度 ($\mathcal{A}$ 曲线下的面积)推算得的跃迁矩平均值 $\langle z \rangle = 14.7 \text{ \AA}$ 。根据同样的材料参数计算出来的对应量理论值列于表1的第2列和表2的第3列(它们都对应于 $a = 65 \text{ \AA}$, $b = 100 \text{ \AA}$, $x = 0.25$),即 $\hbar\omega_{21} = 132 \text{ meV}$, $\delta E = 12.5 \text{ meV}$, $z = 19.7 \text{ \AA}$ 。考虑到理论量与其实验对应量之间在定义上略有差别(特别是 δE 仅代表造成谱宽的一部分物理机制),上述理论与实验值对比结果,总的说来,是比较合理和令人满意的。

四、结 语

最近我们发展了一种 Kronig-Penney 模型新形式,特别适用于对超晶格物理性质的分析和实用器件的设计。子带间光跃迁特性的研究和红外器件的设计就是这种应用的重要方面。本文鉴于这些实际需要,在上述理论新形式的基础上,进而推导出包络态间跃迁矩与超晶格波矢 k 的关系,以及子带间光吸收特性与跃迁矩等物理量之理论关系式。用我们自己最近的实验结果,对理论进行了初步检验,指出这种理论模型的可用性和局限性。同时选择材料参数的适当范围,通过数值计算,详细阐述了吸收谱三个重要量随势阱宽、势垒宽和合金成分比的变化规律及其相关的物理机制。这些也将对实验和器件研究有一定参考价值。

本文所给的例子,包括隧穿效应显著的 ($b < \delta^{-1}$) 以及隧穿效应可忽略的 ($b \gg \delta^{-1}$) 的情形 [δ 由 (3) 式定义, δ^{-1} 为波函数穿透深度。关于上述两种情形的联系和差别,已在文献 [4] 中给出详细分析]。后一种情形 ($b \gg \delta^{-1}$) 通常称为多量子阱结构,以区别于隧穿效应显著的超晶格。故本文理论和实际例子不局限于超晶格,也包括了多量子阱结构。

- [1] R. de L. Kronig and W. J. Penney, *Proc. Roy. Soc.*, **130A**(1930), 499.
- [2] L. C. West and S. J. Eglash, *Appl. Phys. Lett.*, **46**(1985), 1156.
- [3] H-S Cho and P. R. Prucnal, *Phys. Rev.*, **36B**(1987), 3237.
- [4] 潘少华等, *物理学报*, **39**(1990), 1446.
- [5] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **24B**(1981), 5693.
- [6] D. Ahn and S-L. Chuang, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-23**(1987), 2196.
- [7] M. C. Tatham *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **63**(1989), 1637; F. H. Julien *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **53**(1988), 116.
- [8] L. Esaki, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-22**(1986), 1611.
- [9] M. A. Afromowitz, *Solid State Comm.*, **15**(1974), 59.
- [10] Chen Zhenghao *et al.*, *Chinese Phys. Lett.*, **7**(1990), 319.

STUDY OF INTERSUBBAND OPTICAL TRANSITIONS IN GaAs/Al_xGa_{1-x}As SUPERLATTICES

PAN SHAO-HUA CHEN ZHENG-HAO FENG SI-MIN CUI DA-FU YANG GUO-ZHEN

Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080

(Received 26 February 1990)

ABSTRACT

In this article, we investigate the properties (transition frequency, bandwidth, and dipole transition moment) of intersubband optical transitions by using the new general form of the Kronig-Penney model developed recently. The theoretical results are in good agreement with our experimental measurements of infrared absorption in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattice.

PACC: 7830; 7125T