

用推广的平面波展开法检验平面内极化的 电子子带跃迁

张满红 朱邦芬¹⁾ 黄 绮 王文新 周均铭

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

1)(中国科学院半导体研究所, 北京 100083)

(1996 年 5 月 6 日收到)

把平面波展开包络函数的方法推广到求解 8 带的哈密顿量,使它同时包括 Γ_1^c 和 Γ_{15}^c . 在这种方法里,可以考虑反演不对称性、能带的非抛物性、有效质量不连续性以及自旋-轨道耦合等效应的影响. 作为应用,计算了两个量子阱结构的子带和光跃迁概率. 实验上在这两个结构中观察到了平面内极化的电子子带跃迁. 计算表明这种跃迁的概率很小. 实验上观察到的平面内极化的电子子带吸收可能有其他的机制.

PACC: 7360F; 7865

1 引 言

最近几年,人们在量子阱子带跃迁的物理和器件应用(如量子阱红外探测器)方面的研究取得了长足的进步^[1]. 由于人们认为平面内极化的电子子带跃迁是禁戒的,所以采用 45° 角入射或光栅耦合的方法以增加吸收. 这样就带来了工艺的复杂化. 最近, Peng 等^[2-5]发现在高掺杂的 n^+ InGaAs/InAlAs 量子阱中可以有强度与沿生长方向极化(以下称 Z-极化)的跃迁相比拟的平面内极化的电子带跃迁. 他们还发现两种跃迁的能量并不完全相同. 此外,还有一些实验报道了观测到平面内极化的电子带跃迁^[6,7]. 一方面由于这些实验结果和通常的看法不一致,另一方面由于这种跃迁很重要,因此研究其产生的机制是很有意义的.

理论上, Peng 等提出产生这种跃迁的原因是空间反演不对称^[4,5]. 他们考虑更高的 Γ_{15}^c 把通常的 8 带的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰论推广到 14 带的情形. 由于空间反演不对称,引起了 Γ_{15}^c , Γ_1^c 和 Γ_{15}^c 之间的附加耦合,这种耦合即使在平面内波矢 $\mathbf{k}_\parallel = 0$ 时仍然存在. 他们认为正是这种耦合产生了大的平面内极化的电子子带跃迁. 然而,他们的结果是错误的,因为他们假设空间反演不对称引起的附加耦合和直接的偶极耦合的强度相同. 朱邦芬等^[8]曾研究了空间反演不对称对电子子带的影响,发现这种影响是很小的. Shik^[9]提出有效质量不连续可以引起大的从束缚态到准束缚态的平面内极化的电子子带跃迁. 但是我们发现他用的基函数有错误. Yang^[10,11]提出平面内极化的跃迁是可能的. 根据他的理论,当势阱区和势垒区的有效质量差较大时,平面内极化的跃迁可以发生在具有同样宇称的态之间. 然而在 Peng 等的实验中观察到的平面内极化的子带跃迁却发生在基态和第一激发态之间.

在这个工作中我们把汤蕙等^[12]用平面波展开包络函数的方法推广到 8 带的情形,使它同时包括 Γ_1^* 和 Γ_{15}^* . 在这种方法中,用体布洛赫波函数作为基,我们的方法满足流守恒条件,同时又避免了转移矩阵方法中求解复波矢的复杂. 利用这种方法计算了阱宽为 6.6 nm 的 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.67}\text{Al}_{0.28}\text{As}$ 量子阱和阱宽为 4.0 nm 的 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ 量子阱中的平面内极化的光导致的电子子带跃迁概率.

2 用推广的平面波展开包络函数的方法求解 8 带的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法通常用来得到高对称点的能带做微扰展开. 为了得到 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量,用 Lowdin 微扰论把态分成两组,其中第一组处在感兴趣的能量范围,第二组的能量远离第一组. 我们准确地处理其中一组中各态之间的相互作用,而对第二组态和第一组之间的相互作用当作微扰处理. 现在的情形,我们对量子阱的导带子带感兴趣,所以我们精确地处理态 Γ_1^* 和 Γ_{15}^* ,而把其他态当作微扰. 这是允许的,因为 Γ_{15}^* 等态离 Γ_1^* 态很远,它们的耦合比态 Γ_1^* 和 Γ_{15}^* 之间的耦合弱得多.

考虑电子自旋和自旋-轨道相互作用,8 带下带边的布洛赫函数为

$$|\Gamma_6^*, \pm 1/2\rangle = |S, \uparrow\rangle, \quad (1)$$

$$|\Gamma_8^*, \pm 3/2\rangle = i/\sqrt{2} |X \pm iY, \uparrow\rangle, \quad (2)$$

$$|\Gamma_8^*, \pm 1/2\rangle = i/\sqrt{6} (|X + iY, \downarrow\rangle - 2|Z, \uparrow\rangle), \quad (3)$$

$$|\Gamma_7^*, \pm 1/2\rangle = i/\sqrt{3} (|X + iY, \downarrow\rangle + |Z, \uparrow\rangle), \quad (4)$$

$$|\Gamma_6^*, -1/2\rangle = -|S, \downarrow\rangle, \quad (5)$$

$$|\Gamma_8^*, -3/2\rangle = -i/\sqrt{2} |X - iY, \downarrow\rangle, \quad (6)$$

$$|\Gamma_8^*, -1/2\rangle = i/\sqrt{6} (|X - iY, \uparrow\rangle + 2|Z, \downarrow\rangle), \quad (7)$$

$$|\Gamma_7^*, -1/2\rangle = i/\sqrt{3} (|X - iY, \uparrow\rangle - |Z, \downarrow\rangle). \quad (8)$$

在这组基下, 8×8 的哈密顿矩阵为 ($\hbar = 1, m_0 = 1/2$.)

$$\begin{pmatrix} D_{el} & -\sqrt{3}A_+ & \sqrt{2}B & -B & 0 & 0 & -A_- & -\sqrt{2}A_- \\ & D_{hh} & \sqrt{2}L & -L & 0 & 0 & -S & -\sqrt{2}S \\ & & D_{lh} & Q & A_+^* & S & 0 & \sqrt{3}L \\ & & & D_{so} & \sqrt{2}A_+^* & \sqrt{2}S & -\sqrt{3}L & 0 \\ & & & & D_{el} & -\sqrt{3}A_- & \sqrt{2}B & -B \\ \text{c. c.} & & & & & D_{hh} & \sqrt{2}L^* & -L^* \\ & & & & & & D_{lh} & Q \\ & & & & & & & D_{so} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

这里 c. c. 表示相应矩阵元的复共轭. 定义 $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$. 哈密顿矩阵的矩阵元定义为

$$D_{cl} = E_v^c + \left(F + \frac{1}{2} \right) k_{//}^2 + k_z \left(F + \frac{1}{2} \right) k_z, \quad (10)$$

$$D_{hh} = - E_v^v - \frac{1}{2} [(\gamma'_1 + \gamma'_2) k_{//}^2 + k_z(\gamma'_1 - 2\gamma'_2) k_z], \quad (11)$$

$$D_{lh} = - E_v^v - \frac{1}{2} [(\gamma'_1 - \gamma'_2) k_{//}^2 + k_z(\gamma'_1 + 2\gamma'_2) k_z], \quad (12)$$

$$D_{so} = - \Delta - E_v^v - \frac{1}{2} (\gamma'_1 k_{//}^2 + k_z \gamma'_1 k_z), \quad (13)$$

$$A_+ = \frac{1}{\sqrt{6}} P k_+ + \sqrt{\frac{2}{3}} \{ G, k_z \} k_-, \quad (14)$$

$$A_- = \frac{1}{\sqrt{6}} P k_- - \sqrt{\frac{2}{3}} \{ G, k_z \} k_+, \quad (15)$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ P, k_z \} - 2i \sqrt{\frac{2}{3}} G k_x k_y, \quad (16)$$

$$L = \sqrt{\frac{3}{2}} \{ \gamma'_3, k_z \} k_-, \quad (17)$$

$$Q = \sqrt{2} k_z \gamma'_2 k_z - \frac{1}{\sqrt{2}} \gamma'_2 k_{//}^2, \quad (18)$$

$$S = \sqrt{\frac{3}{2}} (\gamma k_-^2 - \mu k_+^2), \quad (19)$$

$$\gamma = (\gamma'_2 + \gamma'_3)/2, \quad \mu = (\gamma'_2 - \gamma'_3)/2. \quad (20)$$

这里 $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3$ 为约化 Luttinger 参数; $E_v^c, -E_v^v$ 为导带底和价带顶的能量; $k_z = -i \frac{d}{dz}$

为垂直方向的动量算符; $\{A, B\} = \frac{1}{2}(AB + BA)$ 是平均反对易子, 这种对称化是为了保证哈密顿矩阵的厄密性; P 为带间动量矩阵元, 定义为 $P = -i \langle S | P_x | X \rangle$; 参数 G 表示 Γ_1 通过其他态与 Γ_{15}^v 的间接耦合, 反映了空间反演不对称的强弱. 对 Si 和 Ge 这样的元素半导体, 这一项为零. G 定义为

$$G = \sum_j \frac{\langle S | P_x | U_j \rangle \langle U_j | P_y | Z \rangle}{E_g/2 - E_j}. \quad (21)$$

在我们的计算中忽略线性 k 项的贡献, 因为它们很小. 对于超晶格, 在势阱区哈密顿量为 $H = H_w$, 而在势垒区为 $H = H_b$. 由于两者的布洛赫函数差别很小, 在整个超晶格体积内定义 $H_0 = H_w, \Delta H = H - H_w$. 我们以 H_0 的本征函数为基展开总哈密顿量 H 的波函数. 记 H_0 的本征函数和本征值分别为 $\varphi_i(k_{//}, k_z)$ 和 $E_i(k_{//}, k_z)$. $\varphi_i(k_{//}, k_z)$ 可表示为

$$\varphi_i(k_{//}, k_z) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) | i, k_{//}, k_z \rangle. \quad (22)$$

对于每一个 $\mathbf{k} = (k_{//}, k_z)$ 有 8 个态 ($i = 1, 2, \dots, 8$). V 为归一化体积.

将超晶格的波函数展开成如下形式:

$$\Psi_\mu(\mathbf{k}_{//}, \mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \mathbf{k}_{//} \cdot \boldsymbol{\rho} + i \mathbf{q} \times \mathbf{z})$$

$$\times \sum_{m,i} a_{\mu, m, i} \exp(i m K \times z) | i, k_{\parallel}, q + m K \rangle, \quad (23)$$

这里 $K = 2\pi/L$, L 为超晶格周期, $-\pi/L < q \leq \pi/L$ 为超晶格电子态沿生长方向的波矢. 哈密顿矩阵元为

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_i(k_{\parallel}', q' + m'K) | H | \varphi_i(k_{\parallel}, q + mK) \rangle \\ & = \delta(k_{\parallel}', k_{\parallel}) \delta_{q', q} \{ E_i(k_{\parallel}', k_z) \delta_{m', m} \delta_{i', i} \\ & \quad + \langle i', k_{\parallel}', q' + m'K | \Delta H | i, k_{\parallel}, q + mK \rangle \}, \end{aligned} \quad (24)$$

式中 $\{\cdot\}$ 内的第二项比较复杂, 但仍然可以解析推导, 对空间积分后化成一个矩阵相乘, 就容易用数值方法计算.

3 结果与讨论

利用上面的方法, 我们计算了阱宽为 6.6 nm 的 GaAs/Ga_{0.67}Al_{0.28}As 量子阱和 4.0 nm 的 In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As 量子阱极化的电子子带跃迁概率. 取超晶格的周期为 200 nm, 波矢 $q=0$. 由于势垒足够宽, 计算结果应相当于一个孤立量子阱. Liu 在第一个结构中观察到了平面内极化的电子跃迁^[6]; Peng 在第二个结构中观察到了同样的跃迁^[2-5]. 对于第一个结构, 取导带和价带不连续比为 60:40, 对于第二个结构, 取这个比值为 70:30. 参数 $F, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 可以根据 Cohen 等^[13]的公式计算. 参数 G 的值取自文献 [7]. 平面内极化的电子子带跃迁可能有以下机制: 自旋-轨道耦合、有效质量在势阱区和势垒区不同、非抛物性以及空间反演不对称, 所有这些都包括在我们的计算中.

在 6.6 nm 的 GaAs/Ga_{0.67}Al_{0.28}As 量子阱中, 从第一个电子子带到第二个电子子带的跃迁发生在 9 μm 左右. 我们的计算值为 137 meV, 与它相符. 我们用文献 [14] 中的公式计算了以下两个量用于衡量平面内极化跃迁和 Z-极化跃迁的强度比

$$I_x = \langle \Psi_2 | P_x | \Psi_1 \rangle^2 / \langle \Psi_2 | P_z | \Psi_1 \rangle^2, \quad (25)$$

$$I_y = \langle \Psi_2 | P_y | \Psi_1 \rangle^2 / \langle \Psi_2 | P_z | \Psi_1 \rangle^2. \quad (26)$$

图 1 给出了 I_x, I_y 随平面内波矢 k_x 的变化. 其中包括三种情况: a, a' 考虑所有效应, b, b' 去掉自旋-轨道耦合, c, c' 进一步去掉空间反演不对称的影响, 即令 $G=0$. 可以看到三种情况下, I_x 和 I_y 都很小. 对其他波矢方向得到相同的结论.

在 4.0 nm 的 In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As 量子阱中, 从第一个电子子带到第二个电子子带的跃迁为 4 μm 左右. 我们的计算值为 306 meV, 与它相符. 对于这个结构, 阱区的电子有效质量为 0.041 m_0 , 势垒区为 0.075 m_0 , 相差较大. 然而计算的从第一子带到第三子带的跃迁概率非常小, 因此 Yang 提出的机制在这里是不适合的. 对于从第一子带到第二子带跃迁, I_x 和 I_y 小于 10^{-3} . 所以这里考虑的机制都不能解释实验结果. 实验中的高掺杂使得费密能级的波矢在 $T=0\text{ K}$ 时为 $0.026(\text{au})^{-1}$, 我们的计算包括了波矢范围. 图 2 给出了和图 1 类似的结果. 即使考虑高掺杂引起的多体效应, 也只有 Z-极化的光可以产生退极化效应和子带间等离子激元的吸收. 因此这个问题还需要进一步研究.

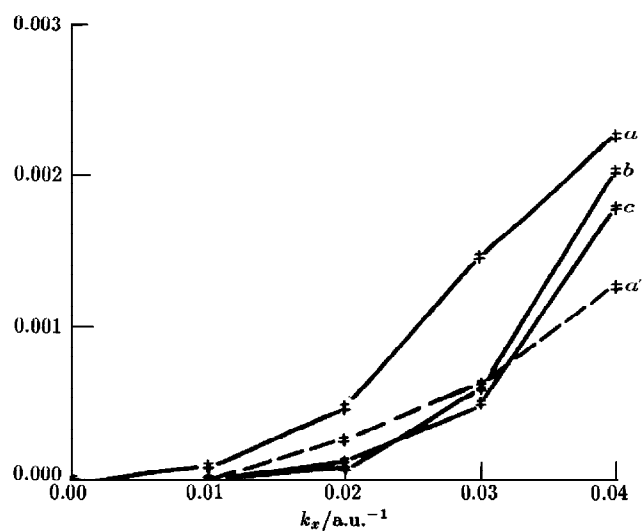


图1 6.6 nm 的 GaAs/Ga_{0.67}Al_{0.33}As 量子阱中 I_x , I_y 随平面内波矢 k_x 的变化曲线 a , a' 考虑所有效应, b , b' 去掉自旋-轨道耦合, c , c' 进一步去掉空间反演不对称的影响. —为 I_x , ---为 I_y , 此时 b' , c' 均为零

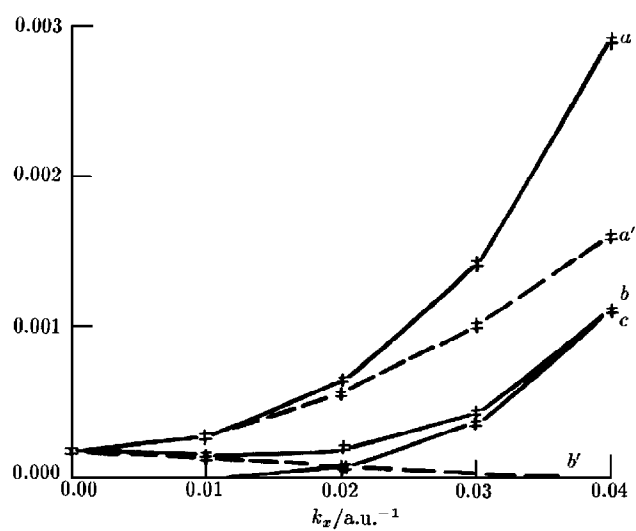


图2 4.0 nm 的 In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As 量子阱中 I_x 和 I_y 随平面内波矢 k_x 的变化曲线 a , a' 考虑所有效应, b , b' 去掉自旋-轨道耦合, c , c' 进一步去掉空间反演不对称的影响. —为 I_x , ---为 I_y , 此时 c' 为零

4 结 论

我们把平面波展开的方法推广到 8 带的情形,这样就自然包括了非抛物性等对导带的影响.利用这种方法计算了两个实验上观察到平面内极化的电子子带跃迁的量子阱的极化跃迁概率.我们的结果表明平面内极化的电子跃迁概率很小.其他文献上提出的机制都不能解释实验结果.这有待进一步研究.

- [1] B. F. Levine, *J. Appl. Phys.*, **74**(1993), R1.
- [2] L. H. Peng, J. H. Smet, T. P. E. Broekaert *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **62**(1993), 2413.
- [3] L. H. Peng, J. H. Smet, T. P. E. Broekaert *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **61**(1992), 2078.
- [4] L. H. Peng and C. G. Fonstad, *J. Appl. Phys.*, **77**(1995), 747.
- [5] L. H. Peng and C. G. Fonstad, *Appl. Phys. Lett.*, **66**(1995), 1806.
- [6] H. C. Liu, M. Buchanan and Z. R. Wasilewski, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 1411.
- [7] E. Rosencher, E. Martinet, E. Bockenhoff *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **58**(1991), 2589.
- [8] Bang-fen Zhu and Yia-chung Chang, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 11932.
- [9] A. Shik, *Inersubband Transitions in Quantum Wells* (Plenum Press, New York, 1992), p. 319.
- [10] R. Q. Yang, *Appl. Phys. Lett.*, **66**(1995), 859.
- [11] R. Q. Yang, J. M. Xu and Mark Sweeny, *Phys. Rev.*, **B50**(1994), 7474.
- [12] 汤 蕙、黄 昆, 半导体学报, **8**(1987), 1.
- [13] A. M. Cohen and G. E. Marques, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 10608.
- [14] Y. C. Chang and J. B. James, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 12672.

EXAMINING THE IN-PLANE POLARIZED INTERCONDUCTION-SUBBAND TRANSITION USING GENERALIZED PLANE WAVE METHOD

ZHANG MAN-HONG ZHU BANG-FEN^{a)} HUANG QI WANG WEN-XIN ZHOU JUN-MING

(*Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing 100080*)

a)(*Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing 100083*)

(Received 6 May 1996)

ABSTRACT

The method of the plane-wave expansion of envelope functions, as applied to calculating the sub-band structures in superlattices, is extended to the 8-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian, in which both Γ_1^c and Γ_{15}^v bands are included. In this method, we can easily take into account of the effects of the non-parabolicity, the discontinuity of the effective masses, the spin-orbit splitting and the inversion asymmetry on subbands. Using this method, we have computed the electronic structure and the optical transition probability of two superlattice systems, in which the in-plane polarized interconduction-subband transitions were observed. Our results show that the probability of such transitions is very small. It is thus expected that there might be other mechanism to be responsible for the experimental results.

PACC: 7360F; 7865