

交叉电场和磁场下 GaAs/AlGaAs 超晶格子带结构

范卫军 夏建白

中国科学院半导体研究所, 北京, 100083

1989 年 11 月 27 日收到

本文用有效质量理论计算了加平行磁场(方向平行于 GaAs/AlGaAs 界面)和垂直电场(方向垂直于界面)的超晶格子带结构和光跃迁。加平行磁场后,空穴子带的二重简并解除,轻重空穴混合。加电场后,产生 Stark 位移,电子和空穴能级发生一定位移。最后,讨论了磁光跃迁概率。

PACC: 7340L; 7820L

一、引 言

近几年,磁场下量子阱超晶格的磁光跃迁的实验和理论有了一系列的报道^[1-5]。项金真、夏建白^[1]计算了垂直磁场(指方向垂直于界面)下 GaAs/AlGaAs 超晶格的电子和空穴的子带结构和磁光跃迁概率等问题。Belle 和 Maan 等人^[2-5]给出了几种 GaAs/AlGaAs 超晶格样品在不同磁场下(包括平行磁场)的磁光跃迁的实验结果,并进行了讨论。但交叉电场和磁场下超晶格的实验报道尚未见到,其理论计算也报道得很少^[7]。对于垂直磁场下的超晶格,在与磁场垂直的平面内,载流子就象谐振子一样做回旋共振运动,其能级为一系列离散的朗道能级。沿磁场方向,即超晶格生长方向,载流子受周期势的限制,其能量亦量子化为一些离散能级。对于平行磁场下的超晶格,情况更为复杂。对弱磁场,超晶格周期势起主要作用,载流子的回旋轨道不再是圆形。此时,能级可以看成是超晶格量子阱中的能级受到外加磁场的微扰。对于强磁场,磁场起主要作用,在量子阱中心附近的载流子的回旋轨道可以是完整的圆。下文着重计算讨论在平行磁场情况同时加垂直电场的超晶格子能带,这时电场使能级发生一定的位移。

二、电场、磁场下超晶格电子结构

采用 Luttinger-Kohn (简称 L-K) 有效质量理论^[6] 来描述超晶格中的电子。假定超晶格生长方向沿 Y 轴,电场沿 Y 方向,磁场沿 Z 方向,见图 1。磁场用矢势 $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ 描述。导带哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\left(p_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right] + V(y), \quad (1)$$

其中

$$V(y) = \begin{cases} V_0 - eF \left[y - k(l+d) - \frac{l+d}{2} \right] & \frac{l}{2} + k(d+l) \leq y \leq \frac{l}{2} + k(d+l) + d; \\ -eF[y - k(l+d)] & -\frac{l}{2} + k(d+l) \leq y \leq \frac{l}{2} + k(d+l), \end{cases}$$

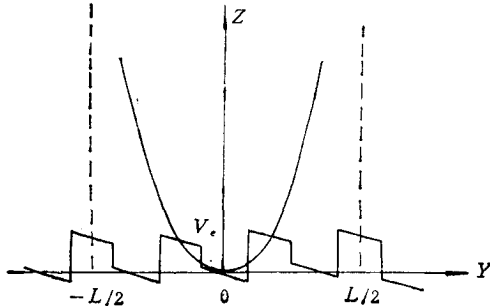


图1 交叉电场磁场下超晶格的周期势

k 为零或整数; m^* 为电子有效质量; l 为阱宽; d 为垒宽; V_0 为导带势垒高度; F 为电场强度; B 为磁场强度. 本文讨论的电场为周期函数, 其周期为 $l+d$. 因为 H 中不含 x, z 分量, 故令 H 的本征态为

$$\phi = \exp[i(k_x x + k_z z)] \chi(y). \quad (2)$$

把(2)式代入下式:

$$H\phi = E\phi \quad (3)$$

得

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \chi''(y) + \frac{m^*}{2} \omega_c^2 (y - Y_0)^2 \chi(y) + V(y) \chi(y) = \varepsilon \chi(y), \quad (4)$$

式中 $\varepsilon = E - \hbar^2 k_x^2 / 2m^*$, $\omega_c = eB/m^*c$, $Y_0 = \hbar k_x c / eB$ (谐振子中心位置). 为计算方便, 作变换 $y = y - Y_0$, 则(4)式改写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \chi''(y) + \frac{m^*}{2} \omega_c^2 y^2 \chi(y) + V(y) \chi(y) = \varepsilon \chi(y) \quad (5)$$

式中

$$V(y) = \begin{cases} V_0 - eF \left[y + Y_0 - k(d+l) - \frac{l+d}{2} \right] & \frac{l}{2} + k(d+l) - Y_0 \leq y \leq \frac{l}{2} \\ & + k(d+l) + d - Y_0; \\ -eF[y + Y_0 - k(d+l)] & -\frac{l}{2} + k(d+l) - Y_0 \leq y \leq \frac{l}{2} \\ & + k(d+l) - Y_0. \end{cases}$$

作这样考虑, 当 $V(y) = 0$ 时, 取适当 L , 把抛物线势限制在阱宽为 L 的一维无限深势阱中, 见图1, 虚线表示一维无限深势阱. 这样可把谐振子的本征态用 N 个一维无限深势阱的能量本征态做展开, 计算出相应的矩阵元, 计算出能级, 结果与严格的一维谐振子解符合得很好. 例如, 当 $B = 10\text{T}$, $m^* = 0.067m_0$, 取 $L = 1000 \text{ \AA}$, $N = 40$, 得到前15个朗道能级是准确值, $E_{14} = 0.2507\text{eV}$; 取 $L = 2000 \text{ \AA}$, $N = 80$, 得到前45个朗道能级是准确值, $E_{44} = 0.7686\text{eV}$. 故交叉电场磁场下超晶格电子能级的计算可用上述方法, 即把本征态 $\chi(y)$ 展开为

$$\chi(y) = \sum_{n=1}^N c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[\frac{n\pi}{L} \left(y + \frac{L}{2} \right) \right], \quad (6)$$

求出哈密顿量 H 在各个基函数间的矩阵元, 解久期方程求得本征能量.

三、空穴的子带结构

对半导体 GaAs 价带空穴, 可采用 L-K 有效质量近似, 哈密顿量可写为^[6]

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{m_0} \left\{ \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \frac{k^2}{2} - \gamma_2 (k_x^2 J_x^2 + k_y^2 J_y^2 + k_z^2 J_z^2) \right. \\ \left. - 2\gamma_3 (\{k_x, k_y\} \{J_x, J_y\} + \{k_y, k_z\} \{J_y, J_z\} + \{k_x, k_z\} \{J_x, J_z\}) \right. \\ \left. + \frac{e}{c} \kappa \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} + \frac{e}{c} q (J_x^3 B_x + J_y^3 B_y + J_z^3 B_z) \right\}, \quad (7)$$

式中 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa, q$ 为 L-K 有效质量参数; m_0 为电子质量。式中已把空穴能量取正。把 (7) 式改写成 $4N \times 4N$ 的矩阵形式^[1,6], 并取 $q = 0$,

$$H_0 = \hbar\omega_c \begin{bmatrix} D_1 & -g_2 a^{+2} - g_1 a^2 & -g_3 a k'_x & 0 \\ -g_1 a^{+2} - g_2 a^2 & D_2 & 0 & g_3 a k'_x \\ -g_3 a^+ k'_x & 0 & D_3 & -g_2 a^{+2} - g_1 a^2 \\ 0 & g_3 a^+ k'_x & -g_1 a^{+2} - g_2 a^2 & D_4 \end{bmatrix}, \quad (8)$$

式中 $\omega_c = \frac{eB}{m_0 c}$, $g_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} (\gamma_2 + \gamma_3)$, $g_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} (\gamma_2 - \gamma_3)$, $g_3 = \sqrt{6} \gamma_3$,

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{eB\hbar}{c} \right)^{-\frac{1}{2}} (k_x + ik_y), \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{eB\hbar}{c} \right)^{-\frac{1}{2}} (k_x - ik_y), \quad k'_x = \left(\frac{eB\hbar}{c} \right)^{-\frac{1}{2}} k_x,$$

$$D_1 = \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \gamma_2 \left[\frac{3}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \frac{9}{4} k_x'^2 \right] + \frac{3}{2} \kappa,$$

$$D_2 = \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \gamma_2 \left[\frac{7}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4} k_x'^2 \right] - \frac{1}{2} \kappa,$$

$$D_3 = \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \gamma_2 \left[\frac{7}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4} k_x'^2 \right] + \frac{1}{2} \kappa,$$

$$D_4 = \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \left(\frac{1}{2} k_x'^2 + a^+ a + \frac{1}{2} \right) - \gamma_2 \left[\frac{3}{2} \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) + \frac{9}{4} k_x'^2 \right] - \frac{3}{2} \kappa.$$

对交叉电场磁场下超晶格价带空穴的哈密顿量可表示为

$$H = H_0 + V(y), \quad (9)$$

式中

$$V(y) = \begin{cases} V_b + eF \left[y + Y_0 - K(d+l) - \frac{l+d}{2} \right] & \frac{l}{2} + k(d+l) - Y_0 \leq y \leq \frac{l}{2} \\ & + k(d+l) + d - Y_0; \\ eF [y + Y_0 - k(d+l)] & -\frac{l}{2} + k(d+l) - Y_0 \leq y \leq \frac{l}{2} \\ & + k(d+l) - Y_0, \end{cases}$$

V_b 为价带势垒高度。

取 H 的本征函数为 ϕ , 则 ϕ 为 4 分量波函数

$$\phi = \begin{bmatrix} \sum_n a_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[\frac{n\pi}{L} \left(y + \frac{L}{2} \right) \right] \\ \sum_n b_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[\frac{n\pi}{L} \left(y + \frac{L}{2} \right) \right] \\ \sum_n c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[\frac{n\pi}{L} \left(y + \frac{L}{2} \right) \right] \\ \sum_n d_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[\frac{n\pi}{L} \left(y + \frac{L}{2} \right) \right] \end{bmatrix} \exp(ik_x x + ik_z z). \quad (10)$$

求出哈密顿量 H 在各基函数间的矩阵元, 解久期方程, 可求出本征能量。

四、跃迁概率

知道了空穴波函数 (10) 式和电子波函数 (6) 式就可计算磁光吸收的跃迁概率。根据有效质量理论, 真正的价带波函数 ϕ_n^v 应是 (10) 式中的 4 个分量分别乘以 4 度简并的带边波函数,

$$u_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow, \quad u_{20} = -\frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow],$$

$$u_{30} = -\frac{1}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow], \quad u_{40} = \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow,$$

式中 X, Y, Z 为价带顶轨道波函数, 箭头代表自旋分量。

导带波函数可写为

$$\phi_c^s = \sum_m G_m^n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[\frac{m\pi}{L} \left(y + \frac{L}{2} \right) \right] |s \uparrow \rangle \text{ (或 } |s \downarrow \rangle \text{)}, \quad (11)$$

则跃迁矩阵元为

$$\langle \phi_c^s \uparrow | p_x | \phi_n^v \rangle = P \sum_m \left\{ \left[a_m^n \frac{1}{\sqrt{2}} - b_m^n \frac{1}{\sqrt{6}} \right] G_m^n \right\};$$

$$\langle \phi_c^s \downarrow | p_x | \phi_n^v \rangle = P \sum_m \left\{ \left[-c_m^n \frac{1}{\sqrt{6}} + d_m^n \frac{1}{\sqrt{2}} \right] G_m^n \right\}. \quad (12)$$

对 p_y, p_z 有类似结果。式中

$$P = \langle s | p_x | x \rangle = \langle s | p_y | Y \rangle = \langle s | p_z | Z \rangle. \quad (13)$$

跃迁矩阵元平方为

$$Q_{nn'} = \frac{2}{m_0} |\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}_{nn'}|^2, \quad (14)$$

$\boldsymbol{\varepsilon}$ 为偏振方向。磁光吸收通常用圆偏振光, 这时用 $p_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_x - ip_y)$, $p_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_x + ip_y)$ 代替 p_x, p_y 。相应的磁光跃迁矩阵元的平方为

$$Q_{nn'}(p_-) = 2 \frac{p_-^2}{2m_0} \left\{ \left[\sum_m a_m^n G_m^n \right]^2 + \frac{1}{3} \left[\sum_m c_m^n G_m^n \right]^2 \right\},$$

$$\begin{aligned}
 Q_{n,n'}(p_+) &= 2 \frac{p^2}{2m_0} \left\{ \left[\sum_m d_m^{n'} G_m^n \right]^2 + \frac{1}{3} \left[\sum_m b_m^{n'} G_m^n \right]^2 \right\}, \\
 Q_{n,n'}(p_2) &= \frac{4}{3} \frac{p^2}{2m_0} \left\{ \left[\sum_m c_m^{n'} G_m^n \right]^2 + \left[\sum_m b_m^{n'} G_m^n \right]^2 \right\}.
 \end{aligned} \tag{15}$$

计算中对电子的正负自旋态进行求和, 参数 (13) 式取为

$$\frac{p^2}{2m_0} = 18.71 \text{ eV}.$$

五、计算结果与讨论

计算中取 $m^* = 0.067m_0$, $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.10$, $\gamma_3 = 2.90$, $\kappa = 1.2$, GaAs 的禁带宽度为 $E_g(\text{GaAs}) = 1.519 \text{ eV}$, AlGaAs 的禁带宽度为 $E_g(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) = E_g(\text{GaAs}) + 1.247x$. 势垒区中 Al 的含量为 35%, 即 $x = 0.35$, 假定 $V_c/V_b = 7/3$, 则 $V_c = 0.306 \text{ eV}$, $V_b = 0.131 \text{ eV}$.

首先计算电场强度分别为 $F = 0$ 和 $F = 20 \text{ kV/cm}$ 时 $B = 10 \text{ T}$, $k_x = 0$, $l = 100 \text{ \AA}$, $d = 50 \text{ \AA}$ 的电子和空穴的 $E-Y_0$ 关系曲线 (即色散关系 $E-k_x$), 见图 2. 其中图 2 (a), (b) 为电子子带色散曲线; 图 2 (c), (d) 为空穴子带色散曲线. 规定每个空穴态的波函数 (10) 式展开系数最大的项代表该态的主要特征. 这样所计算的 8 个空穴能级中前 6 个属于重空穴, 第 7, 8 两个能级属于轻空穴. 见图 2 (a), (c), 电子基态和重空穴基态具有良好的抛物线形状, 但由于轻重空穴的混合, 空穴激发态远远偏离了抛物线形状. 回旋共振轨道中心偏离势阱中心越远, 自旋简并解除越显著. 这是因为回旋共振轨道中心偏离势阱中心, 使 Y 方向的势不再具有反演对称性. 轨道中心偏离势阱中心越远, 这种对称性破坏得越厉害.

见图 2 (b), (d), 加电场后, 由于电场的存在破坏了超晶格周期势关于势阱中心的镜面对称性, 导致电子和空穴的能级关于 Y_0 为镜面的对称不再成立. 电场的存在使回旋共振轨道的中心位置发生位移, 从而电子和空穴基态的能量最小值不再处于 $Y_0 = 0$ 处. 对于电子, 这个最小值的位置向正 Y 方向位移, 见图 2 (b); 对于空穴, 这个最小值的位置向负 Y 方向位移, 见图 2 (d).

加电场后产生 Stark 位移, 即能级发生一定的位移. 为了较清楚地反映出 Stark 位移, 计算了 $k_x = 0$, $k_z = 0$, $B = 10 \text{ T}$, $l = 100 \text{ \AA}$, $d = 50 \text{ \AA}$ 的超晶格电子和空穴能级随电场强度的变化, 见图 3 (a) 和 (b). 电子基态和重空穴基态能量随电场的增大而减小, 且能量位移与电场强度的平方成正比. 而空穴的激发态较复杂, 第 4 个空穴能级随电场增大而增大.

取 $l = 175 \text{ \AA}$, $d = 300 \text{ \AA}$, $k_x = 0$, $B = 10 \text{ T}$, 电场强度分别为 $F = 0$ 和 $F = 20 \text{ kV/cm}$, 其它参数不变, 计算了电子 (见图 4 (a), (b)) 和空穴 (见图 4 (c), (d)) 能级随 Y_0 的变化, 并与 $l = 175 \text{ \AA}$ 的单阱结果比较, 结果基本相符. 图 4 中实线为本文计算结果, 虚线为 Brum 等人¹⁾ 计算的单阱结果. 可见当超晶格势垒宽度和高度足够大时,

1) Brum 等人, 私人通信.

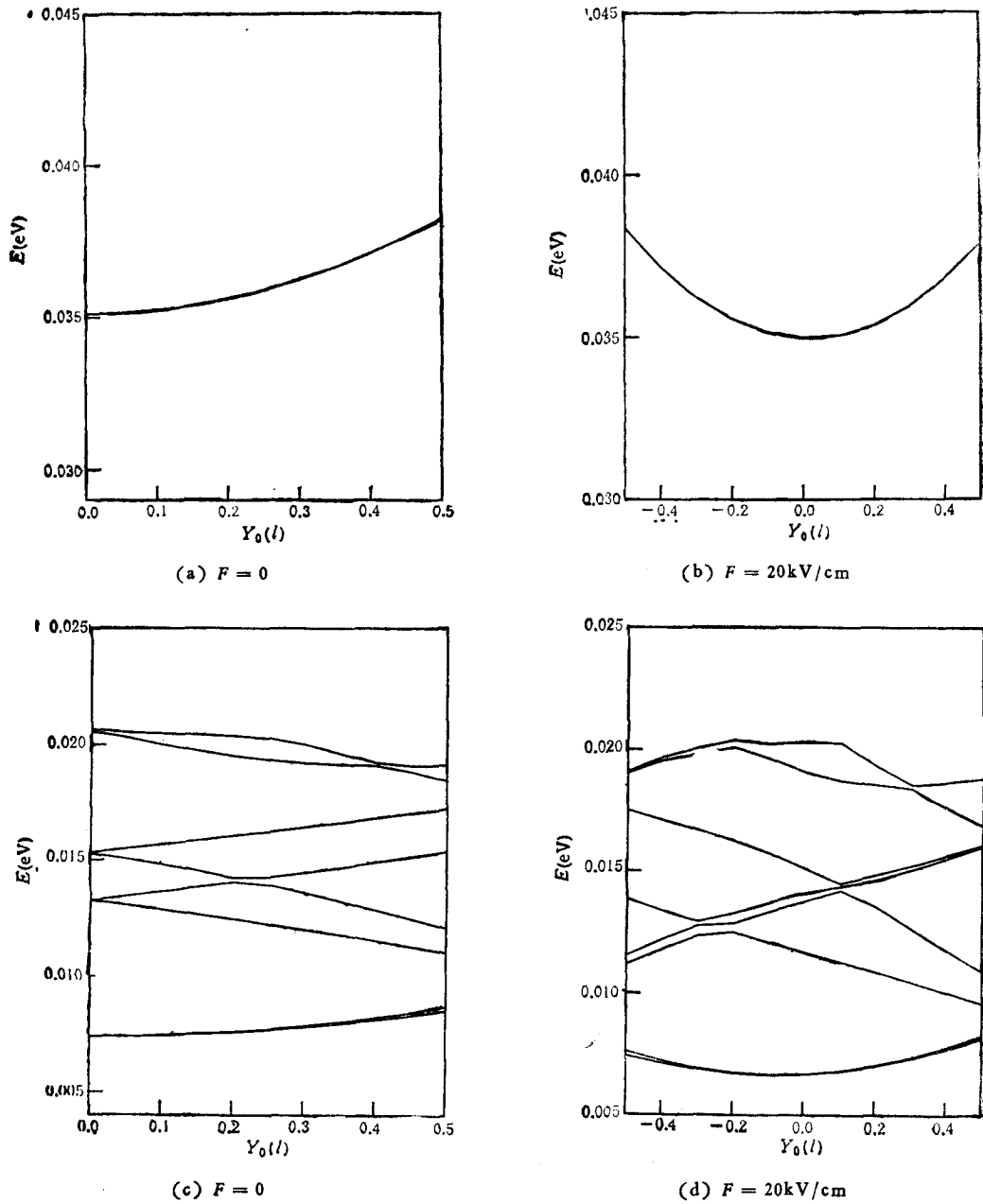


图2 电场强度分别为 $F = 0$ 和 $F = 20 \text{ kV/cm}$ 时电子空穴的子带色散关系

粒子在阱间的穿透很小,量子阱可看成是独立的,此时超晶格可看成是多个独立的单量子阱情况。比较图2与图4,可知加电场产生的 Stark 位移现象对宽阱更显著。图4(d)中的最低两空穴能级出现负值,这是因为加电场后,空穴能级已位移到未加电场时的禁带中。

表1给出 $k_x = 0$, $k_z = 0$, $l = 100 \text{ \AA}$, $d = 50 \text{ \AA}$, $B = 10 \text{ T}$, 电场强度分别为

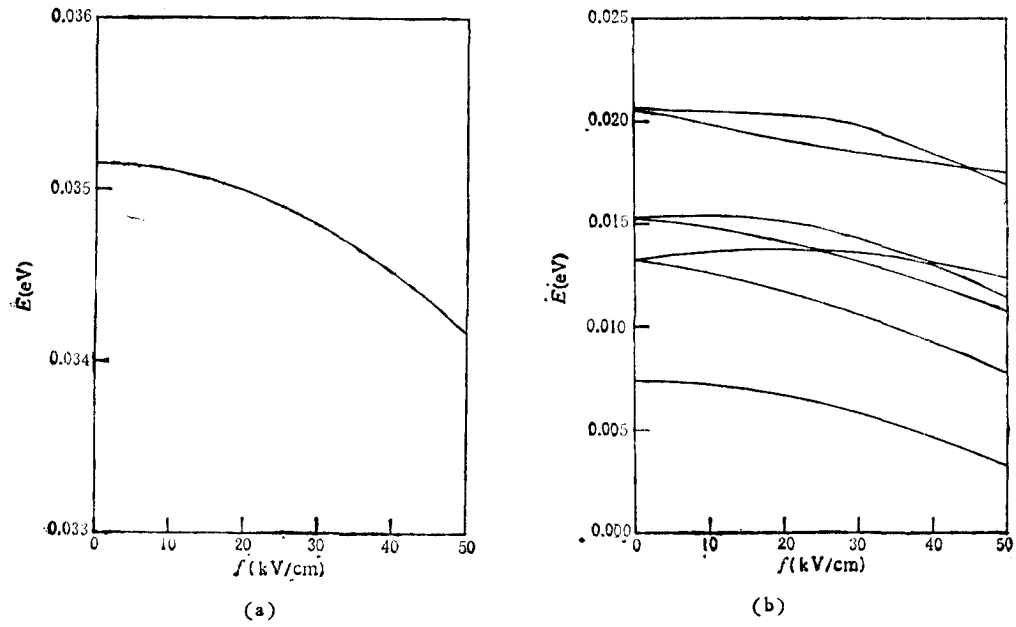


图 3 电子和空穴子带能级随电场强度的变化曲线

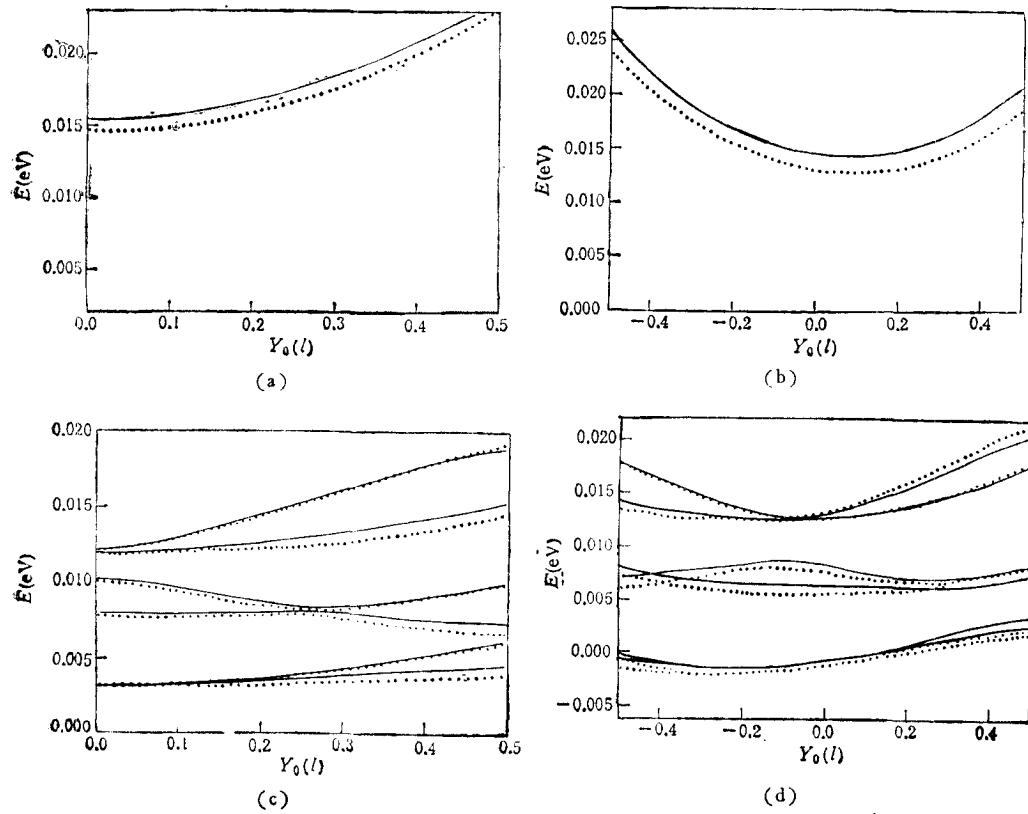


图 4 电场强度分别为 $F = 0$ 和 $F = 20 \text{ kV/cm}$ 时电子和空穴子带色散关系
 $k_x = 0$; $B = 10 \text{ T}$; $l = 175 \text{ \AA}$; $d = 300 \text{ \AA}$

表 1 磁光跃迁矩阵元的平方(单位为 eV). +, -, z 分别代表偏振方向 ϵ_+ , ϵ_- , ϵ_z .

空穴态	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
电场										
$F = 0$	5.01(+) 4.50(-) 9.01(z)	4.84(+) 4.00(-) 9.68(z)			0.03(+) 0.14(-) 0.06(z)		13.07(+) 1.54(-) 3.07(z)	0.02(+) 0.07(-) 0.04(z)		
$F \neq 0$	4.93(+) 4.42(-) 8.83(z)	4.76(+) 3.92(-) 9.51(z)			0.05(-) 0.03(z)	0.02(+) 0.08(-) 0.03(z)		12.90(+) 1.54(-) 3.08(z)		0.08(+) 0.59(-) 0.15(z)

$F = 0$ 和 $F = 20\text{kV/cm}$ 时的磁光跃迁矩阵元的平方。计算中取导带的第一电子能级和价带的前 10 个空穴能级。表 1 中只列出大于 0.02 eV 的 Q 值。从表 1 中可看出大致分为两种跃迁: 一种 ϵ_+ (或 ϵ_-) 和 ϵ_z 方向的 Q 值相差不大; 一种 ϵ_+ (或 ϵ_-) 方向的 Q 值很大, 而 ϵ_z 方向的 Q 值很小。前者属于到重空穴态的跃迁, 后者属于到轻空穴态的跃迁。由此可定出前 6 个空穴态为重空穴, 第 7, 8, 9 空穴态为轻空穴, 第 10 空穴态为重空穴。 $F = 0$ 时, 跃迁概率最大的 3 个空穴态为第 1, 2, 7 空穴态。 $F = 20\text{kV/cm}$ 时, 跃迁概率最大的前 3 个空穴态为第 1, 2, 8 空穴态。加电场后, 电子第一能级向空穴第 1, 2, 7 能级的跃迁概率减小, 其中向空穴第 7 能级的跃迁概率明显减小, 而向空穴第 8 能级的跃迁概率明显增大。

- [1] 项金真, 夏建白, 物理学报, **12**(1988), 1915.
 [2] G. Belle, J. C. Maan and G. Weimann, *Surf. Sci.*, **170**(1986), 611.
 [3] J. C. Mann, *Surf. Sci.*, **196**(1988), 518.
 [4] G. Belle, J. C. Maan and G. Weimann, *Solid State Commun.*, **56**(1985), 65.
 [5] J. C. Maan, in Proc. 17th Intern. Conf. on Physics of Semiconductors, San Francisco, (1984), Eds. D. J. Chad, and W. A. Harrison, Springer, Berlin, (1985), p. 436.
 [6] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.*, **102**(1956), 1030.

SUBBAND STRUCTURE OF GaAs/AlGaAs SUPERLATTICES UNDER CROSSED ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS

FAN WEI-JUN XIA JIAN-BAI

Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing, 10083

(Received 27 November 1989)

ABSTRACT

The subband structure and optical transition of GaAs/AlGaAs superlattices are investigated in the presence of an electric field applied along the growth direction and a magnetic field parallel to the GaAs/AlGaAs interface by using the effective mass theory. In the presence of the parallel magnetic field, the twofold degeneracy is removed and heavy and light holes are mixed. The presence of the electric field introduces the Stark shift. The magnetic-optical transition probability is also discussed.

PACC: 7340L; 7820L