

# 半导体超晶格子带间跃迁光吸收理论研究\*

李文兵 赵国忠 王福合 周云松

(首都师范大学物理系, 北京 100037)

**摘 要** 从理论上研究了半导体超晶格子带间跃迁的光吸收性质, 以 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 超晶格为例进行数值计算, 分析了该材料的吸收系数随入射光光子能量、光场强度和超晶格结构参量(阱宽, 垒宽, 势垒高)的变化关系. 计算表明: 随着入射光光子能量的变化, 出现非对称的吸收峰; 光强只改变吸收系数大小; 超晶格结构参量会改变吸收谱的谱宽和吸收峰所对应的入射光频率. 随着超晶格阱宽(垒宽)的增大, 吸收谱由宽变窄, 吸收峰红移; 随着超晶格 Al 组分变大, 吸收谱变窄.

**关键词** 非线性光学; 子带间吸收; Kronig-Penney 模型; 超晶格

**中图分类号** O437 **文献标识码** A

## 0 引言

自从 1969 年江崎 (Esaki L) 和朱兆祥<sup>[1,2]</sup> 提出超晶格概念以来, 随着分子束外延等技术的不断完善, 半导体多量子阱结构和超晶格的制备、研究和应用受到了日益广泛的重视<sup>[3]</sup>. 由于超晶格是一种人工生长的材料, 可通过选择不同的材料、生长不同的厚度、控制掺杂, 改变势阱的形状等方式来控制材料的性质, 因此超晶格材料具有广阔的应用前景<sup>[2~4]</sup>. 正如 Esaki 所指出<sup>[4]</sup>, 超晶格势接近于 Kronig-Penney 模型<sup>[5]</sup>. Ahn 等人已从理论和实验上证实了子带间光跃迁存在着非线性<sup>[6,7]</sup>, 潘少华等人给出了一种适用于超晶格的 Kronig-Penney 模型的新形式<sup>[8]</sup>, 并在此理论基础上建立了描述光吸收饱和效应的二子能级模型<sup>[9]</sup>. 赵国忠等人推导了半导体超晶格子带间跃迁光学双稳态<sup>[10]</sup>, 超晶格的性质引起了广泛研究<sup>[11~13]</sup>. 本文研究了半导体超晶格子带光吸收, 以 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 超晶格为例进行数值计算, 分析了该材料的吸收系数随入射光能量、光场强度、超晶格结构参量(阱宽, 垒宽, 势垒高)的变化关系.

## 1 理论和模型

超晶格一般是由两种材料薄层交替生长而成的, 由窄带隙材料构成电子和空穴的势阱, 而由宽带隙材料构成势垒. 在超晶格势阱中的电子可用二子能带模型来研究, 量子阱中的非线性光学效应已经得以仔细的研究<sup>[9]</sup>. 由于体元胞周期势为超晶格势所调制, 超晶格子带电子的波函数解析式可由

Kronig-Penney 模型求出<sup>[7]</sup>. 当光诱导的子带间跃迁发生时, 跃迁矩  $\mu_{jj'}(k) = \langle j', k | \mu | j, k \rangle$  是从第  $j$  子带中波矢为  $k$  的包络态到第  $j'$  子带  $k$  态的偶极矩阵元<sup>[8]</sup>. 在二子能带模型近似下, 子带间跃迁仅发生在第一子带与第二子带之间<sup>[8]</sup>, 即  $j, j' = 1$  或  $2$ , 故本文只需计算  $\mu_{21}(k)$ .

式中  $\omega_{21}$  表示第一子带与第二子带之间跃迁中心频率, 定义为:  $\omega_{21} = (\omega_{21}^{\max} + \omega_{21}^{\min})/2$ ,  $\omega_{21}^{\max}$  ( $\omega_{21}^{\min}$ ) 表示为第一子带底(顶)到第二子带顶(底)的跃迁频率, 将  $\delta E = \omega_{21}^{\max} - \omega_{21}^{\min}$  定义为隧穿谱宽.

超晶格对光场的响应, 其基本动力学方程可以由量子力学运动方程导出, 计及衰减效应, 力学量期待值的运动方程可以表示为

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [A, H] \rangle - \Gamma \langle A \rangle \quad (1)$$

式中  $\Gamma$  代表衰减算符. 在旋波近似下, 利用超晶格子带间跃迁的光学 Bloch 方程, 可以得到光学 Bloch 方程稳态解, 再利用吸收系数与 Bloch 变量间的关系, 可以得到超晶格子带间光跃迁的吸收系数的解析式<sup>[10]</sup>

$$\alpha(\omega, E) = \alpha_0 \sum_k \frac{\bar{\mu}_k^2 D_k}{1 + (\bar{\omega}_k - \bar{\omega})^2 + \bar{\mu}_k^2 (E/E_s)^2} \quad (2)$$

式中  $\alpha_0 = N_d \omega |\mu_{21}(0)|^2 / (2n_r c \epsilon_0 \hbar \gamma_i)$  代表线性吸收系数的特征值,  $N_d$  是掺杂电子浓度,  $n_r$  是超晶格材料的折射率,  $c$  为光速,  $E$  描述超晶格中的光场慢变振幅, 光场强度  $I/I_s = |E/E_s|^2$ , 饱和电场强度  $E_s \equiv \hbar \sqrt{\gamma_i \gamma_t} / \mu_{21}(0)$ ,  $\omega_k$  是跃迁频率,  $\omega$  是入射光频率, 归一化频率  $\bar{\omega}_k \equiv \omega_k / \gamma_i$  和  $\bar{\omega} \equiv \omega / \gamma_i$ ,  $\mu_{21}(0) = \mu_{21}(k)|_{k=0}$ , 并且定义归一化偶极矩  $\bar{\mu}_k \equiv \mu_{21}(k) / \mu_{21}(0)$ ,  $\gamma_i$  和  $\gamma_t$  分别代表纵向弛豫速率和相位相干的横向弛豫速率,  $D_k = \frac{2}{N_d V} \sum_{k_t} (n_{1k}^0 - n_{2k}^0)$  是归一化的初始布居差<sup>[9]</sup>

\*北京市教育委员会科技发展计划项目资助(项目编号: 2228132)  
Tel: 010-68902945 Email: liwenbing89@sohu.com  
收稿日期: 2005-03-14

$$D_k = \frac{N_{1k} - N_{2k}}{N_d} = \frac{m * k_B T}{N_d N d \pi \hbar^2} \cdot \ln \frac{1 + \exp[(E_F - E_{1k})/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_{2k})/k_B T]} \quad (3)$$

式中,  $N$  称为超晶格的周期数,  $d = a + b$  是超晶格的周期,  $a$  和  $b$  分别是阱宽和垒宽.  $N_{1k}$  和  $N_{2k}$  分别为第一子带和第二子带上电子的布居数.  $E_F$  是费米能级,  $T$  是温度.

吸收系数的表达式表明, 超晶格子带间跃迁的吸收系数, 不仅与入射光频率和光强有关, 而且还与超晶格子带结构、偶极矩及初始布居差有关. 而初始布局差是由超晶格结构参量(阱宽、垒宽、垒高)等物理量决定的.

## 2 计算结果及分析

以 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 超晶格为例, 通过数值计算、分析和讨论超晶格子带间跃迁的吸收系数与入射光频率、掺杂电子浓度以及超晶格的阱宽、垒宽和

Al组分之间的变化关系. 所取超晶格结构参量:  $N = 100$ , 根据文献[14], GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 的势垒高度由式(4)给出

$$V_0 = Q \Delta E_g \quad (4)$$

式中  $Q$  为能带偏置参量, 其值为 0.6;  $\Delta E_g$  为势垒材料(Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As)和势阱材料(GaAs)能隙之差; 由式(5)决定[14]

$$\Delta E_g = 1266 + 260x^2 \quad (5)$$

式中  $x$  为 Al 组分,  $\Delta E_g$  的单位为 eV.

假定掺杂电子浓度为  $N_d = 1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  横向和纵向弛豫率取为<sup>[9]</sup>:  $\hbar \gamma_t = 4.608 \text{ MeV}$  和  $\hbar \gamma_l = 1.317 \text{ MeV}$ . 分别研究入射光能量、光场强度, 以及超晶格结构参量(阱宽、垒宽和势垒高)对吸收系数的影响. 计算结果见图 1, 理论计算基本参量: 温度 300 K, 光场强度  $I/I_s = |E/E_s|^2 = 0$ , 势阱宽 9 nm, 势垒宽 3 nm, Al 组分 0.3.

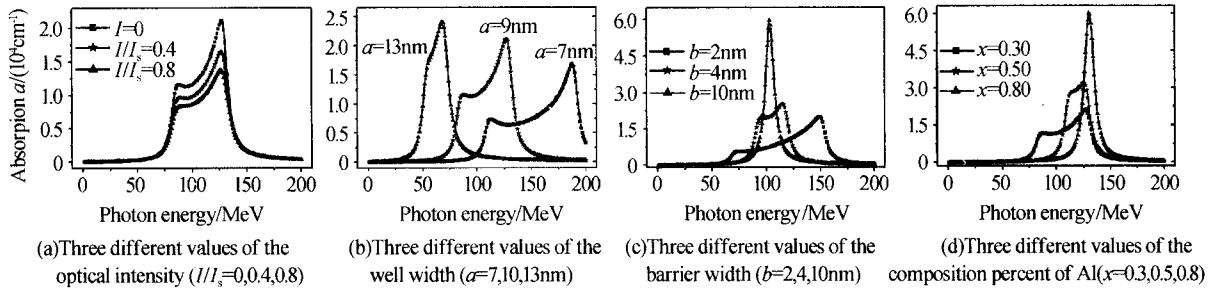


图 1 超晶格子带间跃迁光吸收曲线

Fig. 1 The curve of intersubband transition optical absorption of semiconductor superlattice

图 1(a) 为超晶格子带间跃迁的吸收系数与入射光光子能量间的关系曲线, 同时图中示出了不同光强下的吸收谱. 在不同频率入射光下, 吸收谱线不是很对称, 这充分反映了超晶格子带间跃迁和电子隧穿的特征, 随着入射光频率的变化, 超晶格不同子能级间的跃迁与光场共振, 该跃迁频率所对应的子能级间的吸收对总的贡献最大, 同时由于弛豫引起的子能级均匀展宽, 其它子能级间的吸收也有一定的贡献. 由于不同能级间吸收的权重(中心跃迁频率  $\omega_{21}$ , 谱宽  $\delta E$ 、偶极矩  $\mu_k$  和电子初始布居差  $D_k$  决定)不同, 因而出现非对称的吸收峰. 同时吸收谱有一定的展宽, 此即电子隧穿. 同时图 1(a) 示出了在相同的入射光光子能量, 相同的超晶格结构参量, 不同的光场强度下, 吸收谱的变化趋势. 在光场作用下, 超晶格中的电子在子带间跃迁引起极化, 随着光场强度的增大, 共振子带间光吸收饱和, 从而吸收系数逐渐变小. 但是在不同的光场下, 最大吸收峰所对应的入射光光子能量变化很小, 对于所分析的超晶格样品, 基本上保持在  $\hbar \omega_s = 125.0 \text{ MeV}$  附近.

这表明子带间共振的位置由超晶格结构参量决定, 与入射光光场的强度没有关系.

图 1(b) 中示出了不同势阱宽度  $a$ , 超晶格子带间跃迁吸收谱曲线. 其中, 相同的入射光光子能量、相同温度以及相同的光场强度, 固定垒宽度  $b$  和合金组分  $x$ . 随着阱宽增大, 量子限制变小, 在  $V_0$  给定的情况下, 中心跃迁频率  $\omega_{21}$  变小, 吸收谱峰红移; 随着阱宽增大, 隧穿效应变小, 谱宽  $\delta E$  变小, 导致吸收谱由宽变窄.

类似的情况, 改变势垒宽  $b$ , 可以分析超晶格吸收谱特性如图 1(c). 随着垒宽增大, 量子限制效应增强, 中心跃迁频率  $\omega_{21}$  变小, 类似图 1(b) 情况出现吸收峰红移; 随着垒宽增大, 波函数的穿透概率迅速减小, 谱宽  $\delta E$  变大, 偶极矩  $\mu_k$  变大, 但是随着  $b$  的增大二者会趋于平稳, 而电子初始布居差  $D_k$  变小, 导致吸收谱由宽变窄, 次吸收峰变得不明显. 吸收谱特征由超晶格结构过渡到多量子阱结构.

图 1(d) 为不同 Al 组分下超晶格子带间跃迁吸收谱曲线. 其中, 相同的入射光光子能量、相同温度

以及相同的光场强度, 固定势阱宽度  $a$  和势垒宽度  $b$ . 势垒高度  $V$ 。随  $x$  的增加是逐渐增大的, 量子限制效应加强, 中心跃迁频率  $\omega_{21}$  变大, 吸收峰蓝移, 但吸收峰位置变化较小; 随着 Al 组分增大, 电子隧穿效应变小, 谱宽  $\delta E$  变小, 导致吸收谱由宽变窄。

### 3 结论

综上所述, 超晶格子带间吸收特性不仅与入射光频率和强度有关, 而且还与环境温度和超晶格结构等参量有关。由于量子限制效应和电子隧穿效应的影响, 随着入射光能量的变化, 出现了非对称吸收峰; 入射光光强只改变谱宽; 超晶格结构对吸收有较大的影响。随着超晶格阱宽(垒宽)增大, 吸收谱变窄, 吸收峰红移, 次吸收峰变得不是很明显, 显示吸收特性由超晶格结构过渡到了多量子阱结构; 随着超晶格 Al 组分增大, 阱间耦合变弱, 吸收谱变窄, 同样显示了由超晶格结构向多量子阱结构的过渡。分析表明, 可以通过设计超晶格结构参量, 得到所需要的超晶格子带间吸收谱特性, 超晶格子带间的光学吸收问题对研究远红外光学探测器件和光学实验具有重要的理论指导意义。

#### 参考文献

- Esaki L. In Highlights in Condensed Matter Physics and Future Prospects. Plenum, New York, 1991. 83~89
- Esaki L, Tsu R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM J Res Develop*, 1970, **14**(1): 61~65
- Adenilson J, Chiquito, Jr F L. Controlling the optical properties of disordered GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As superlattices. *Phys Rev B*, 2004, **69**(11): 113310 ~ 113313
- Esaki L. A bird's eye view on the evolution of semiconductor superlattices and quantum wells. *IEEE J Quantum Electron*, QE-1986, **22**(9): 1611~1624
- de Kronig L K R, Penney W J. Quantum mechanics in crystals lattices. *Proc Roy Soc A*, 1930, **130**(814): 499~513
- Ahn D, Chuang S L. Intersubband optical absorption in a semiconductor quantum well. *J Appl Phys*, 1987, **62**(7): 3052~3055
- Ahn D, Chuang S L. Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field. *IEEE J Quantum Electron*, QE-1987, **23**(12): 2196~2204
- Pan S H, Feng S M. General formalism of the kronig-penney model suitable for superlattice applications. *Phys Rev B*, 1991, **44**(9): 5668~5671
- Pan S H, Feng S M. Optical saturation of intersubband absorption in semiconductor super lattices. *Phys Rev B*, 1991, **44**(10): 8165~8169
- Zhao G Z, Pan S H. Dispersive optical disability of semiconductor superlattice in mid infrared region. *Solid State Communications*, 1995, **99**(8): 595~603
- 田园, 彭宇恒, 陈维友, 等. 四种材料构成的超晶格能带结构的研究. *光子学报*, 1997, **26**(7): 599~603  
Tian Y, Peng Y H, Chen W Y. *Acta Photonica Sinica*, 1997, **26**(7): 599~603
- 张党卫, 张景文, 侯洵. 半导体超晶格属性的高分辨率 X 射线衍射研究. *光子学报*, 2002, **31**(8): 1007~1011  
Zhang D W, Zhang J W, Hou X. *Acta Photonica Sinica*, 2002, **31**(8): 1007~1011
- Tan Peng, Li Bin, Lu Hong, et al. Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorption in the poschl2teller well. *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(7): 815~818
- Ahn D, Chuang S L. Calculation of linear and nonlinear inter subband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field. *IEEE J Quantum Electron*, QE-1987, **23**(12): 2196~2204

## Intersubband Transition Optical Absorption of Semiconductor Supperlattice

Li Wenbing, Zhao Guozhong, Wang Fuhe, Zhou Yunsong

*Department of Physic, Capital Normal University, Beijing 100037*

Received date: 2005-03-14

**Abstract** The absorption induced by intersubband transition in semiconductor superlattice was studied. Numerical illustrations of the optical absorption in a GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  superlattice were given. The optical absorption coefficient as a function of the incident optical frequency, the optical intensity, the temperature and the structure parameters of superlattices (The width of quantum well, the barrier width and the composition percent of Al) were obtained. The simulation results showed that the absorption spectra of superlattice appeared as asymmetric absorption band. The optical intensity only changed the magnitude of absorption coefficient. The structure parameters of superlattice could change the width of absorption spectra and the resonant photon energy. The wider the well or barrier were, the narrower the absorption band became the smaller the center absorption band, the bigger was the absorption coefficients, and the absorption peak red shifted. The absorption band became narrow and the absorption coefficients increased, when the composition percent of Al increased.

**Keywords** Nonlinear optics; Intersubband absorption; Kronig-penney model; Superlattice



**Li Wenbing** was born in 1979, He'nan Province, P. R. China. He got his B. S. degree in physics from He'nan Nomal University, Xinxiang, China, in 2003. Now he is studying at the Capital Normal University of China for Master's Degree. His research interests are optical and electronic material.