

文章编号: 1000-5862(2012)01-0083-04

重空穴轻空穴共同作用下 GaN 柱形量子点的 Franz-Keldysh 振荡

高海燕¹, 李 聪², 张天杰¹, 袁 超²

(1. 华北水利水电学院数学与信息科学学院, 河南 郑州 450011; 2. 河南农业大学理学院, 河南 郑州 450002)

摘要: 利用包络函数和有效质量理论计算了 GaN 柱形量子点的电调制反射谱, 并用 Airy 函数表示其柱坐标下薛定谔方程的解. 着重分析了重空穴轻空穴共同作用下的 GaN 柱形量子点电调制反射谱的 Franz-Keldysh 振荡, 并比较了与重空穴、轻空穴单独作用下波形的不同. 随着调制电压逐渐增大, 重空穴轻空穴共同作用下的电调制反射谱与其单独作用时一样出现 Stark 频移, 即量子限制 Stark 频移.

关键词: 量子点; Franz-Keldysh 振荡; 量子限制 Stark 频移

中图分类号: O 437 文献标志码: A

0 引言

调制光谱技术是在现代的相敏检测技术和数字处理技术的基础上发展起来的, 用来测量在外界微扰或测量系统内部参数周期性变化时光谱的微小改变^[1-2]. 目前, 调制光谱在低维半导体结构(如量子阱、量子点等)和器件(如垂直腔表面发射激光器、高电子迁移率晶体管、异质结双极晶体管等)的表征上显示出特有的优势. 调制的种类很多, 包括电场、磁场、应力温度等, 其中电场调制被广泛应用. 它在半导体临界点附近表现出尖锐的微分形式的线形, 且对表面、界面电场非常敏感. 电调制反射(或吸收)光谱是当外加电场时, 材料光学常数变化所引起的样品反射(或吸收)的相对变化率的光谱^[3-6].

GaN 是一种直接带隙的宽禁带半导体材料(其禁带宽度为 3.4 eV), 化学结合能很大, 具有较高的热稳定性和化学稳定性, 耐高温、耐腐蚀且具有高结合强度. GaN 电子饱和速率很大, 载流子迁移率高, 击穿电场强度较大^[7-8]. 以上的特性决定了它具有广泛的应用前景和相当大的市场潜力.

在此, 本文用电调制反射谱来研究 GaN 圆柱形量子点的带间跃迁, 当光子能量大于半导体的禁带宽度时, 就会出现 Franz-Keldysh 振荡(简称 FKO).

对 GaN 圆柱形量子点施加直流电压, 并加交流电压进行调制, 当改变直流电场强度时, 量子点的跃迁能产生改变, 导致量子限制 Stark 频移. 对于直接跃迁半导体, 电子吸收光子的跃迁主要发生在能带的 Γ 点. 存在于价带中的重空穴和轻空穴的精细结构, 使得当光从不同的方向照射时产生不同的极化: 当入射光的偏振方向垂直于入射界面时, 只需要考虑轻空穴的跃迁; 当入射光的偏振方向平行于入射界面时, 就需要考虑重空穴和轻空穴的共同作用. 本文主要研究后一种情况.

1 理论和计算

对于一个圆柱形的 GaN 量子点, 设横截面半径为 R , 圆柱长度为 L , 将 3 维直角坐标系建立在圆柱体的中央, xy 平面在截面上, z 轴在圆柱体的长度方向上. 施加平行于 z 轴的外加电场 F , 忽略电子和空穴的相互作用, 由包络函数理论, 处于导带中电子和价带中空穴的总哈密顿量可写为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{d^2}{dz_h^2} - eF(z_e - z_h) + E_g, \quad (1)$$

下标 e 代表电子, h 代表空穴(可以是轻空穴或重空穴), E_g 表示导带与价带之间的禁带宽度. 采用中心质量 Z_c 和相对位置 z 对(1)式进行化简为

收稿日期: 2011-09-10

基金项目: 国家自然科学基金(10947162)和河南省基础与前沿技术研究计划(112300410261)资助项目.

作者简介: 高海燕(1979-), 女, 河南郑州人, 讲师, 硕士, 主要从事非线性光学研究.

$$Z_c = \frac{m_e z_e + m_h z_h}{m_e + m_h}, \quad z = (z_e - z_h), \quad (2)$$

哈密顿量写为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dZ_c^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_h} \frac{d^2}{dz^2} - eFz + E_g, \quad (3)$$

其中 M 表示电子和空穴(轻空穴或重空穴)的总质量, 即 $M = m_e + m_h$, μ_h 表示其相应的约化质量且 $\mu_h = m_e m_h / M$. 考虑到圆柱体模型的特点及哈密顿量在平行 z 轴方向和垂直 z 轴方向是弱耦合, 总的波函数用柱坐标来表示为

$$\Psi(\rho_\beta, \theta_\beta, z_\beta) = \phi_\beta(z) h(\rho_\beta, \theta_\beta), \quad (4)$$

其中 β 代表电子、轻空穴或者重空穴. 垂直于 z 轴的波函数和能量本征值为

$$h(\rho_\beta, \theta_\beta) = B \frac{J_m(x_l^m \rho_\beta / R)}{J_{m+1}(x_l^m)} e^{im\theta_\beta},$$

$$E(\rho_\beta, \theta_\beta) = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{x_l^m}{R} \right)^2, \quad (5)$$

其中 B 表示归一化常数, J_m 表示第 m 阶 Bessel 函数, x_l^m 表示第 m 阶 Bessel 函数的第 l 个零点, 即 $J_m(x_l^m) = 0$. 平行于 z 轴的薛定谔方程为^[10]

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu_h} \frac{d^2}{dz^2} - eFz \right) \phi(z) = E_r \phi(z). \quad (6)$$

引入变换

$$\xi = \left(\frac{2\mu_h eF}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(z + \frac{E_r}{eF} \right) \quad (7)$$

并代入(6)式, 可以将其变换成标准 Airy 方程, 其解用 Airy 函数表示为

$$\phi(z) = c_n Ai(\xi), \quad (8)$$

其中 c_n 是波函数的归一化常数. 当一束光以频率 ω 、偏振方向沿 $\hat{\varepsilon}$ 方向入射时, 吸收系数为^[11]

$$\alpha(\omega) \propto \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \frac{\hbar\omega}{n_b \hbar} \sum_{nm} \int_0^\infty |\hat{\varepsilon} \cdot M_{nm}|^2 \frac{\mu_h}{\pi \hbar^2} \frac{\Gamma}{(\hbar\omega - E - E_{nm})^2 + \Gamma^2} dE_{nm}, \quad (9)$$

其中 n_b 是折射系数, Γ 是 Lorentzian 展宽, E_{nm} 是电子和空穴(轻空穴或者重空穴)之间的能级差, $E_{nm} = E_{en} - E_{hm}$. 对于偶极矩阵元, 请参考文献[12], 当入射光的偏振方向平行于 xy 平面时为

$$|\hat{\varepsilon} \cdot M_{nm}|^2 = \frac{1}{4} \langle S | ex | X \rangle^2 \left[\langle \phi_{en} | \phi_{hm} \rangle^2 + \frac{1}{3} \langle \phi_{en} | \phi_{lm} \rangle^2 \right]. \quad (10)$$

当入射光的电场方向平行于 z 轴时

$$|\hat{\varepsilon} \cdot M_{nm}|^2 = \frac{1}{3} \langle S | ez | Z \rangle^2 \langle \phi_{en} | \phi_{lm} \rangle^2, \quad (11)$$

由以上计算可得在调制电场下的调制吸收系数为

$$\Delta\alpha(\omega) = \alpha(\omega, F_1) - \alpha(\omega, F_2).$$

当光子能量在半导体的基本带宽附近时, 在调制电场的作用下, 参照文献[5], 电反射系数和复合介电函数有关, 由 Seraphin 系数 a 和 b , 可以得到

$$\Delta R / R = a(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \delta\varepsilon_1 + b(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \delta\varepsilon_2, \quad (12)$$

其中 $\delta\varepsilon_1$ 和 $\delta\varepsilon_2$ 是微扰引起的复合介电函数的变化, 而 $\delta\varepsilon_1$ 实部的变化与 $\delta\varepsilon_2$ 虚部的变化之间有 Kramer-Kronig 关系^[13].

当入射的光子能量大于禁带宽度时, 即 $E > E_g$ 时, 相互作用区域的 FKO 就很明显, 它的振荡形式可以近似表达为下式, 且此式在实验上已经得到验证^[14].

$$\frac{\Delta R}{R} \propto A(F_i) \cos \left[\frac{2}{3} \left(\frac{E - E_g}{\hbar\Omega_q} \right)^{3/2} - \pi \frac{d-1}{4} \right],$$

其中 $(\hbar\Omega_q)^3 = (e\hbar F_i)^2 / 2\mu_h$, F_i 是相应的电场强度, μ_h 是前面所提到的沿电场方向电子和空穴(重空穴或者轻空穴)的约化质量, 振幅 $A(F_i)$ 是电场的慢变函数, d 表示所研究对象的空间维数.

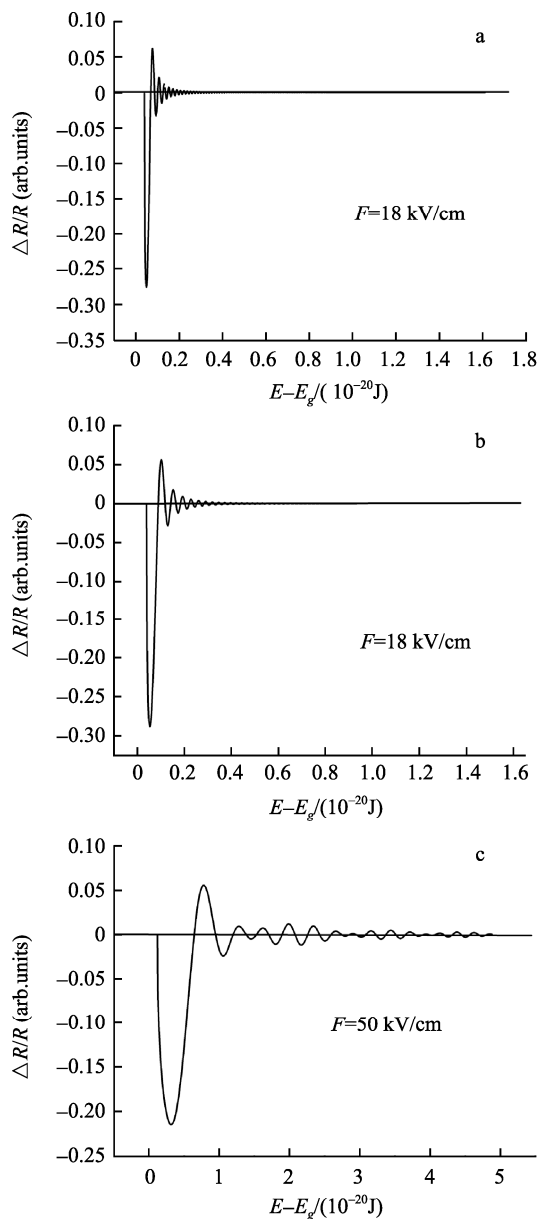
2 结果和讨论

以上为 GaN 圆柱形量子点的电调制反射谱的理论计算, 在外加电场的调制作用下, 光谱呈现 FKO 的特点. 下面改变加在样品上的电场强度, 观察 FKO 的变化, 并着重讨论轻空穴和重空穴共同作用下调制光谱的特点. 在计算中, 取 GaN 的禁带宽度为 $E_g = 3.4$ eV; 电子有效质量为 $m_e = 0.2m_0$, 其中 m_0 是电子的静止质量(以下相同); 轻空穴的有效质量为 $m_{lh} = 0.22m_0$; 重空穴的有效质量为 $m_{hh} = 1.49m_0$ ^[15-17]; Lorentzian 展宽为 $\Gamma = 10$ meV. 所加的调制电场强度在 10~100 kV/cm 之间变化. 当入射光的极化方向平行于入射面时, 需要同时考虑轻空穴和重空穴的共同作用, 请参考文献[18-19], 取轻空穴和重空穴在光学作用过程中的贡献为 1:2.

首先, 比较轻空穴、重空穴单独作用与共同作用时波形的不同. 图1(a)、图1(b)中分别是轻空穴、重空穴单独作用下的电调制反射谱, 所加直流偏压

均为 $F=18 \text{ kV/cm}$. 可以看出, 在外加调制电压作用下, 出现了 FKO, 并且当入射光子的能量大于禁带宽度时, 即 $E > E_g$ 时, 振荡开始. 振荡的振幅随着入射光子 E 的变化而变化, 总的来说是随着 E 的增加振幅先增大后来慢慢减弱.

而且, 比较图 1(a)和图 1(b)可以知道, 在相同的调制电压下, 二者波形的振荡衰减的程度是不一样的, 图 1(b) 重空穴单独作用时振荡达到最大值较快且最大值大于图1(a), 最终振幅趋于零也比较快. 关于轻空穴、重空穴单独作用下的电调制反射谱的比



(a) 当外加偏压 $F=18 \text{ kV/cm}$, 只考虑轻空穴作用情况下的电调制反射谱; (b) 当外加偏压 $F=18 \text{ kV/cm}$, 只考虑重空穴作用情况下的电调制反射谱; (c) 轻空穴和重空穴共同作用下的电调制反射谱.

图 1 电调制反射谱图

较见文献[20], 本文主要分析轻空穴、重空穴单独作用与共同作用时波形的不同. 图 1(c)为轻空穴、重空穴共同作用下的电调制反射谱, 为了看清楚波形的特点, 此处所加直流偏压为 $F=50 \text{ kV/cm}$. 与轻空穴、重空穴单独作用时的情况相比, 可以明显地看出它们共同作用时的波形有明显的不同: 在轻空穴或重空穴单独作用时, 在同一电场强度的作用下, FKO 的振幅都是随着入射光子能量的增加而逐渐地减小, 但是在图 1(c)中, 可以明显地看出在电场强度的不变的情况下, 振幅随着入射光子能量的增加是先变小, 但是到了第 4 个波峰, 横坐标的值为 $1.9 \times 10^{-20} \text{ J}$ 时, 振幅开始增大, 然后再接着变小, 等到横坐标的值为 $3.1 \times 10^{-20} \text{ J}$ 时, 又有一次增加, 但是比起第一次振幅的增加幅度要小. 可以预测其后还有振幅再次增加的位置, 但是增加的幅度越来越小, 到最后总的趋势是振幅趋于零, 这一点与重空穴和轻空穴单独作用时的情况一致. 之所以出现以上情况是因为于轻空穴和重空穴共同参与作用的结果.

其次, 分析在不同直流偏压的作用下轻空穴、重空穴共同作用时的电调制反射谱的不同, 见图 2. 由图 2 可知, 在每个波形中也即同一电场强度的作用下, 波形的变化都具有上述特点. 比较不同电场强度的波形可以发现: 首先, 波峰的位置随着电场强度的增加而右移, 即在轻空穴和重空穴共同作用时电调制反射谱的 FKO 随着入射光子能量的增加也出现了蓝移, 即量子限制 Stark 频移; 其次, 随着电场强度的增加 FKO 的衰减逐渐变慢, 如电场强度为 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 时, 振幅趋于零的位置大约在横坐标的 $1.4 \times 10^{-20} \text{ J}$ 处, 而当电场强度为 $F = 37 \text{ kV/cm}$ 时, 振幅趋于零的位置大约在横坐标的 $3.6 \times 10^{-20} \text{ J}$ 的位置; 再次, 振荡振幅的变化情况是随着电场强度的

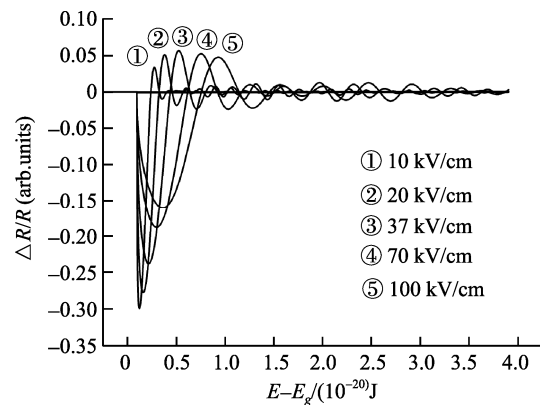


图 2 不同直流电场强度下轻空穴、重空穴共同作用下的电调制反射谱图

增加先增大而后再减小, 大约在 $F = 37 \text{ kV/cm}$ 时, 振荡振幅达到最大值。以上这些结果与轻空穴和重空穴分别单独作用时的变化趋势一样, 只是 3 种情况下的具体的横坐标不同^[20]。

3 结论

本文阐述了 GaN 柱形量子点的电调制反射谱, 其谱线呈现 Franz-Keldysh 振荡, 着重分析了轻空穴、重空穴共同作用下的电调制反射谱谱线的特点, 并与轻空穴、重空穴单独作用下的谱线进行了对比。另外, 随着外加电场的增加, 轻空穴重空穴共同作用下电调制反射谱的 FKO 振荡产生了蓝移, 即出现量子限制 Stark 频移效应, 这一点与轻空穴、重空穴单独作用下的情况一致。

4 参考文献

- [1] Aspnes D. Handbook on semiconductors [M]. New York: North-Holland, 1980: 109-116.
- [2] 金鹏. In/GaAs 自组装量子点结构和光学性质研究 [D]. 北京: 中国科学院半导体研究所, 2003.
- [3] Chen R B, Lu Yanten. Theoretical study of modulated absorption spectra: from quantum wire to quantum [J]. Phys Lett A, 2000, 264: 417-423.
- [4] Hsr T M, Chang W H, Huang C C, et al. Quantum-confined stark shift in electroreflectance of a InAs/In_xGa_{1-x}As self-assembled quantum dots [J]. Appl Phys Lett, 2001, 78: 1760-1762.
- [5] Shen H, Dutta M. Franz-Keldysh oscillations in modulation spectroscopy [J]. J Appl Phys, 1995, 78: 2151-2175.
- [6] Aspnes D E, Studna A A. Schottky-Barrier electroreflectance: application to GaAs [J]. Phys Rev B, 1973, 7: 4605-4625.
- [7] Yu M Sirenko, Jeon J B, Kim K W, et al. Envelope-function formalism for valence bands in wurtzite quantum wells [J]. Phys Rev B, 1996, 53(4): 1997-2009
- [8] Litvinov V I. Optical transitions and gain in group-III nitride quantum wells [J]. J Appl Phys, 2000, 88(10): 5814-5820
- [9] Li Junjie, Liu Liming, Yao Duanzheng. Piezoelectric field-dependent optical nonlinearities induced by interband transition in InGaN/GaN quantum well [J]. Physica E, 2005, 27: 221-226.
- [10] Xu Yong, Xiong Guiguang. Quadratic electro-optic effects and electro-absorption process in semiconductor carbon nanotubes [J]. Physica E, 2004(25): 23-28.
- [11] Yamada M, Ishiguro H. Gain calculation of undoped GaAs injection laser taking account of electronic intra-band relaxation [J]. Jpn J Appl Phys, 1981, 20: 1279-1288.
- [12] Chen R B, Lu Yanten. Critical thickness of quantum well for observing Franz-Keldysh oscillation [J]. Solid State Communications, 2000, 114: 117-120.
- [13] Aspnes D E. Electric field effects on the dielectric constant of solids [J]. Phys Rev, 1967, 153: 972-982.
- [14] Aspnes D E, Studna A A. Schottky-barrier electroreflectance: application to GaAs [J]. Phys Rev B, 1973(7): 4605-5625.
- [15] Tansley T L, Egan R J. Point-defect energies in the nitrides of aluminum, gallium, and indium [J]. Phys Rev B, 1992, 45: 10942-10950.
- [16] Suzuk M. First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN [J]. Phys Rev B, 1995, 52: 8132-8139.
- [17] Jeon J B, MSirenko Y, Kim K W. Valence band parameters of wurtzite materials [J]. Solid State Commun, 1996, 99(6): 423-426.
- [18] Batchelor R N, Hamnett A. Proceedings of the society of photo-optical instrumentation engineers [M]. SPIE, Bellingham, WA, 1990, 1286: 175-177.
- [19] Wysin G M, Smith D L, Redondo A [J]. Picosecond Phys Rev B, 1988(38): 12514-12524.
- [20] 高海燕, 李聪, 袁超. GaN 圆柱形量子点的量子限制 Stark 频移 [J]. 江西师范大学学报: 自然科学版, 2011, 35(3): 228-230.

The Franz-Keldysh Oscillations of Cylindrical GaN Quantum Dot of Light Hole and Heavy Hole Contributed Together

GAO Hai-yan¹, LI Cong², ZHANG Tian-jie¹, YUAN Chao²

(1. College of Mathematics and Information Science, North China University of Water Resources and Electric Power, Zhengzhou Henan 450011, China; 2. College of Sciences, He'nan Agricultural University, Zhengzhou Henan 450002, China)

Abstract: The electroreflectance spectrum of cylindrical GaN quantum dot have been calculated in the effective-mass approximation and envelop function. The solution of the Schrödinger equation under cylindrical coordinate system can be expressed in the term of Airy function. Under the contribution of light hole and heavy hole, the electroreflectance spectra exhibits Franz-Keldysh oscillation characteristic and its difference was compared with the spectra with the contribution of light hole (or heavy hole) separately. It is found that Franz-Keldysh oscillations exhibit Stark shift when the electric field intensity increased with the contribution of light hole (or heavy hole) separately or of both.

Key words: quantum dot; Franz-Keldysh oscillation; quantum-confined Stark shift

(责任编辑: 冉小晓)