

Электроотражение и отражение структуры GaAs/AlGaAs с одиночной квантовой ямой при комнатной температуре

© А.А. Герасимович*[†], С.В. Жоховец*[†], Г. Гобш[†], Д.С. Доманевский*

* Белорусский национальный технический университет,
220100 Минск, Белоруссия

[†] Institute of Physics, Ilmenau Technical University,
98684 Ilmenau, Germany

(Получена 14 сентября 2004 г. Принята к печати 2 ноября 2004 г.)

Исследовано электроотражение и отражение структуры GaAs/AlGaAs с одиночной квантовой ямой при комнатной температуре. Наблюдалось осциллирующее поведение сигнала электроотражения в зависимости от толщины верхнего барьера AlGaAs. Экспериментальные данные анализируются с использованием диэлектрической функции квантовых ям и метода матриц переноса для слоистых систем, что позволяет определить параметры квантовых ям и барьерных слоев.

1. Введение

Полупроводниковые структуры с квантовыми ямами (КЯ) широко используются для изготовления инжекционных лазеров, светодиодов, фотоприемников, оптических модуляторов. Конструирование, оптимизация и контроль технологических параметров таких приборов требуют точного знания оптических свойств КЯ (энергетический спектр электронов и матричные элементы оптических переходов) и толщин слоев в структуре. Оптические свойства исследуются в основном при низких температурах. В таких методах, как поглощение, отражение, фотолюминесценция, спектры возбуждения фотолюминесценции, сигнал определяется величиной диэлектрической функции (ДФ) квантовой ямы и оптическими константами других слоев структуры. Однако при переходе к комнатным температурам, что существенно упрощает организацию контроля параметров, чувствительность традиционных низкотемпературных методов снижается из-за теплового уширения оптических переходов, размытия энергетического распределения электронов и дырок, а также уменьшения вклада экситонных эффектов. Вместе с тем в методах модуляционной спектроскопии, таких как электроотражение (ЭО) и фотоотражение, сигнал определяется главным образом производной от ДФ квантовой ямы. Вследствие этого методы модуляционной спектроскопии сохраняют свои высокие чувствительность и спектральное разрешение вплоть до комнатной температуры.

Ключевым пунктом в количественном анализе оптических спектров является знание ДФ квантовой ямы. В литературе часто используются полуэмпирические модели, например лоренцевский или гауссовский осциллятор [1–5], что позволяет учесть конкретный вид спектра энергетических состояний в КЯ, в частности сильную непараболичность валентной зоны (ВЗ) и зависимость матричного элемента оптических переходов от энергии фотона. Недавно мы [6] сообщили о расчете ДФ одиночной КЯ GaAs/AlGaAs, как функции

плотности двумерного электронного и дырочного газов, путем самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера. В настоящей работе эти результаты используются для анализа спектров электроотражения нелегированной структуры при комнатной температуре. Знание ДФ позволяет нам применить формализм матриц переноса для многослойных систем [7] и учесть при расчете оптических спектров все слои и границы раздела, присутствующие в структуре. При этом вклад КЯ рассчитывается точно, а не рассматривается как подгоночный параметр, как это было сделано в серии работ Klipstein и др. путем введения некоторой эмпирической функции (см., например, [1]). Мы показываем, что спектр электроотражения одиночной КЯ сильно зависит от толщины верхнего барьера AlGaAs. Анализ экспериментальных данных по ЭО и отражению позволяет определить энергии оптических переходов, толщины КЯ и обоих барьеров, что может быть использовано как неразрушающий метод контроля структур при комнатной температуре.

2. Эксперимент

В работе исследована структура GaAs/AlGaAs с одиночной КЯ, выращенной методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs с ориентацией (100). Образец содержал последовательно выращенные при температурах 580 и 400°C нелегированные буферные слои GaAs толщиной 200 и 310 нм соответственно, два нелегированных барьера $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (нижний и верхний) с GaAs КЯ, расположенной между ними, и защитный слой GaAs толщиной 17 нм. Толщины нижнего барьера, КЯ и верхнего барьера, определенные на основании экспериментальных данных (см. разд. 4), составили 157.5, 9.61 и 214.5 нм. Обнаружено, что содержание Al в барьерах несколько различно и составило $x = 0.308$ для верхнего и $x = 0.316$ для нижнего.

Отражение и ЭО измерялись при комнатной температуре в электролитической ячейке при падении света, близком к нормальному. Электролит состоял из

[†] E-mail: Andrei.Herasimovich@tu-ilmenau.de

3-процентного водного раствора смешанных в пропорции 1:2 винной кислоты и этиленгликоля. Платиновое кольцо и насыщенный каломелевый электрод использовались в качестве рабочего и опорного электродов соответственно. Напряжение смещения U_{dc} и модулирующее напряжение прямоугольной формы с амплитудой U_{mod} и частотой 64 Гц (в случае измерения электроотражения) прикладывались с помощью потенциостата. Отметим, что U_{dc} есть потенциал задней стороны образца (подложка GaAs) по отношению к опорному электроду. Приводимые далее спектры записаны при $U_{dc} = 0$ и $U_{mod} = 1.5$ В. Спектральное разрешение монохроматора было не хуже 0.5 мэВ. Использовалась стандартная методика синхронного детектирования.

Толщина верхнего барьера AlGaAs изменялась путем анодного окисления структуры в том же электролите. Контроль толщины выращенного окисла осуществлялся по изменению величины отражения на длине волны 372 нм. Окисел удалялся в концентрированном водном растворе NH_3OH . После первого шага травления был полностью удален защитный слой GaAs и около 10 нм верхнего барьера. На 9-м шаге травления была удалена КЯ и началось травление нижнего барьерного слоя AlGaAs.

3. Расчет диэлектрической функции квантовой ямы

Зонная структура и волновые функции электронов и дырок в КЯ определялись из самосогласованного решения уравнений Пуассона и Шредингера. Зона проводимости считалась несвязанной с валентной зоной и рассматривалась в рамках модели с энергетически зависимой массой [11,12]. Зонная структура валентной зоны и волновые функции дырок рассчитывались kp -методом с использованием 4×4 оператора Гамильтона в осевой аппроксимации [10–13]. Данный гамильтониан описывает взаимодействие подзон тяжелой дырки (hh) и легкой дырки (lh). Как было показано авторами [11–13], осевая аппроксимация дает точные значения энергий и волновых функций в центре зоны Бриллюэна (волновой вектор электрона $k_p = 0$) и хороший результат в его окрестности. Механические напряжения в структуре не учитывались. Дифференциальные уравнения решались методом конечных дифференциалов с постоянным шагом дискретизации 0.1 нм в направлении роста. При решении уравнения Шредингера волновые функции электронов и дырок в барьерах AlGaAs полагались равными нулю на расстоянии 15 нм от краев КЯ. Граничные условия для решения уравнения Пуассона определялись напряжением, приложенным к поверхности структуры, и положением уровня Ферми в буферном слое GaAs в термодинамическом равновесии. Использовались стандартные параметры материалов для расчета зонной структуры [14]. Полагалось, что уровень остаточного легирования для всех слоев, кроме КЯ, составляет $1 \cdot 10^{14}$

и $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ для донорной и акцепторной примесей соответственно.

Из подгонки расчетных энергий оптических переходов к наблюдаемым в спектрах электроотражения исследованной структуры (подробнее см. разд. 4) были получены толщина квантовой ямы 9.61 нм и соотношение разрыва зоны проводимости и валентной зоны 75/25. Толщина квантовой ямы оказалась на один моноатомный слой больше номинального значения (9.33 нм), заданного при росте структуры. Найденное значение соотношения разрыва зон оказалось немного выше общепринятого для расчета зонной структуры, равного 65/35, однако находится в области ранее наблюдавшихся значений [11,12,14–16]. Для указанных параметров число квантованных состояний в зоне проводимости оказалось равным 3 (E_1 , E_2 и E_3), а в валентной зоне — 6 (hh_1 – hh_4 и lh_1 , lh_2). Полученные энергии оптических переходов из соответствующего подуровня валентной зоны на подуровень зоны проводимости сведены в табл. 1.

Мнимая часть диэлектрической функции КЯ определялась в рамках дипольной аппроксимации в предположении прямых переходов в пространстве квазимпульса [17,18]. Используя соотношение Крамерса–Кронига, рассчитывали действительную часть ДФ. Входящие в выражения для определения ДФ матричные элементы поляризованного параллельно плоскости КЯ света рассчитывались через волновые функции зоны проводимости и валентной зоны. Экситонными эффектами пренебрегли вследствие их малого вклада при комнатной температуре.

Рассчитанная для нулевого напряжения на структуре (напряженность электрического поля в КЯ около 7 кВ/см) диэлектрическая функция КЯ представлена на рис. 1. Стрелками обозначены энергии оптических переходов, дающих наибольший вклад в ДФ. Другие переходы, указанные в табл. 1, являются запрещенными и имеют малую амплитуду. Их однозначная идентификация при комнатной температуре затруднительна. Расчет и анализ экспериментальных данных показал, что приложение к структуре модулирующего напряжения 1.5 В приводит к изменению электрического поля в КЯ от приблизительно нулевого значения до 20 кВ/см. Это изменение электрического поля ведет к небольшому изменению ДФ квантовой ямы главным образом вследствие эффекта Штарка, который и является основным механизмом электроотражения исследованной КЯ. Отметим, что обсуждаемое изменение ДФ незаметно

Таблица 1. Рассчитанные энергии оптических переходов

ЗП	ВЗ					
	hh_1	lh_1	hh_2	hh_3	lh_2	hh_4
E_1	1.4677	1.4814	1.4898	1.5248	1.5391	1.5618
E_2	1.5655	1.5793	1.5877	1.6227	1.6370	1.6596
E_3	1.6998	1.7138	1.7220	1.7569	1.7712	1.7939

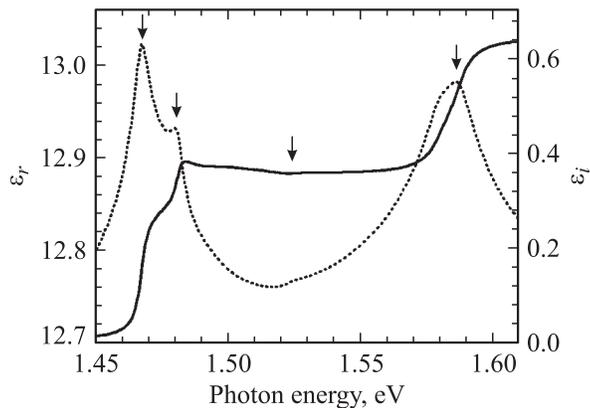


Рис. 1. Действительная (ϵ_r) и мнимая (ϵ_i) части диэлектрической функции КЯ в исследованной структуре. Стрелками обозначены энергии оптических переходов, дающих наибольший вклад в ДФ (слева направо hh_1E_1 , lh_1E_1 , hh_3E_1 и hh_2E_2).

в масштабе рис. 1. Например, уменьшение энергии перехода hh_1E_1 при указанных условиях составляет около 1 мэВ. Кроме того, расчет показал, что вследствие малой концентрации электронов при использованных экспериментальных условиях структура с точки зрения распределения потенциала может рассматриваться как плоский конденсатор, между обкладками которого приложено напряжение.

4. Результаты эксперимента и их обсуждение

На рис. 2 представлены экспериментальные спектры отражения (a) и ЭО (b) после первого и девятого травлений. Стрелками указаны энергии запрещенной зоны буферного слоя GaAs и барьеров $Al_xGa_{1-x}As$, а также энергии основных оптических переходов КЯ, найденные из подгонки рассчитанных спектров ЭО к экспериментальным. Пики в окрестности 1.42 эВ соответствуют объемному GaAs (буферный слой). Далее следует сигнал от квантовой ямы: в энергетическом интервале 1.46–1.57 эВ располагаются оптические переходы из валентной зоны на первую подзону электронов (hh_1E_1 , lh_1E_1), в интервале 1.57–1.67 эВ идентифицированы переходы на E_2 (hh_2E_2 , lh_2E_2) и интервал 1.67–1.8 эВ соответствует переходам на E_3 (hh_3E_3). Видно, что сигнал квантовой ямы намного сильнее в спектре электроотражения, что непосредственно свидетельствует о существенно большей чувствительности модуляционной методики. В конце спектра присутствуют два перехода (см. спектры после 1-го травления), соответствующие объемному сплаву $Al_xGa_{1-x}As$ с содержанием алюминия, равным 0.308 и 0.316. Рисунок также демонстрирует, что после 9-го травления в спектре электроотражения отсутствует сигнал от КЯ, а вместо двойной структуры в области AlGaAs наблюдается только один переход, соответствующий $x = 0.316$.

На рис. 3 показаны спектры электроотражения в области переходов между основными подуровнями тяжелых (hh_1) и легких (lh_1) дырок и основным подуровнем электронов (E_1) после шагов травления от первого до восьмого. Видно, что уменьшение толщины верхнего барьера приводит к тому, что максимум сигнала постепенно трансформируется в минимум и, наоборот, минимум — в максимум. В результате форма сигнала восстанавливается после нескольких шагов травления (см., например, спектры после 2 и 6 или 3 и 7 травлений). Другими словами, величина сигнала электроотражения на фиксированной энергии фотона является осциллирующей функцией толщины верхнего барьера. Такое поведение наблюдается для всех оптических переходов в КЯ, причем период осцилляций уменьшается с ростом энергии фотона.

Наблюдаемый эффект объясняется тем, что источник сигнала электроотражения — квантовая яма — находится внутри структуры, а в результате травления длина оптического пути света в верхнем барьере уменьшается. Расчет показал, что форма сигнала электроотражения в спектральной области переходов в КЯ зависит также и

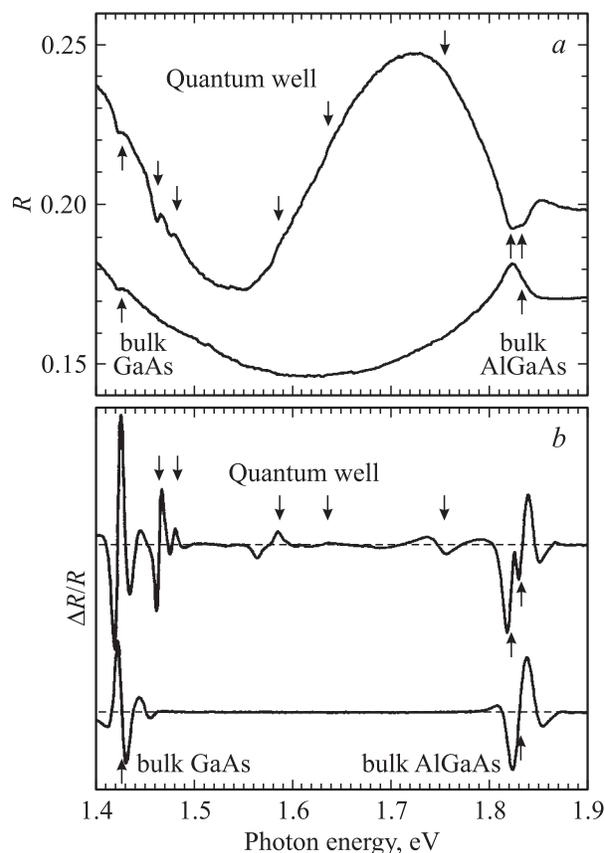


Рис. 2. Спектры отражения (a) и электроотражения (b) после 1-го и 9-го травлений. Стрелками, направленными вверх, показаны энергии запрещенной зоны GaAs (буферный слой), и нижнего и верхнего барьеров $Al_xGa_{1-x}As$. Стрелки, направленные вниз, указывают энергии основных оптических переходов в КЯ (hh_1E_1 , lh_1E_1 , hh_2E_2 , lh_2E_2 и hh_3E_3).

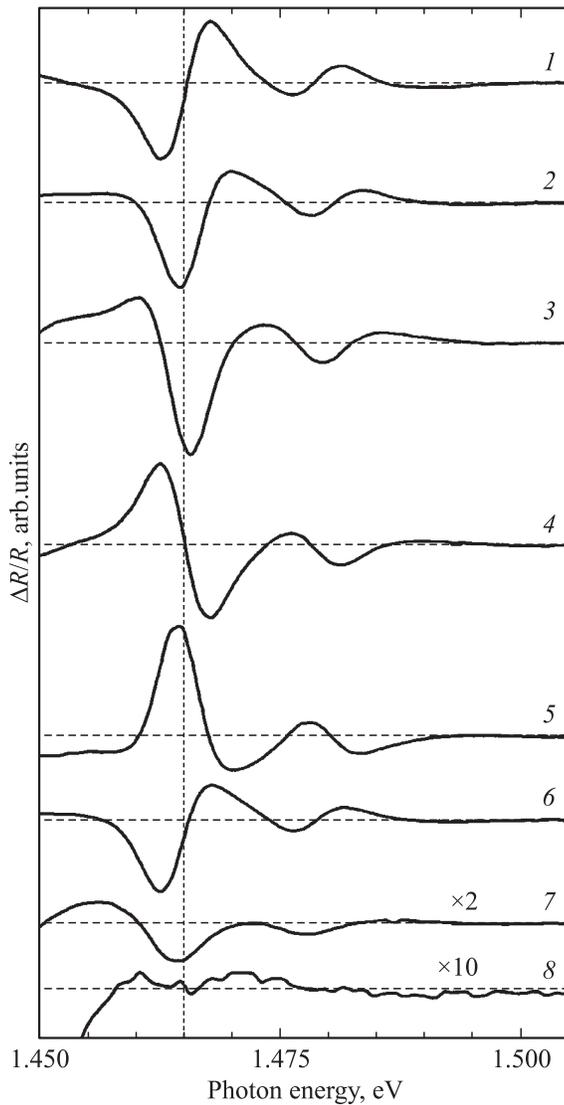


Рис. 3. Спектры электроотражения в спектральной области основных переходов в КЯ (номер травления обозначен 1–8).

от других слоев в структуре, в частности от толщины нижнего барьера. Это связано с интерференцией света и показывает, что все слои и все границы раздела в структуре должны быть учтены при количественном анализе спектров электроотражения. Аналогичный вывод справедлив, конечно же, и для спектров отражения. Однако в этом случае вклад пропорционален толщине слоев. В результате влияние КЯ на спектр отражения оказывается относительно небольшим (см. рис. 2). Кроме того, поскольку содержание Al в барьерах приблизительно одинаково, на практике лишь суммарная толщина барьеров может быть найдена по спектрам отражения. С другой стороны, как будет показано далее, совместное использование методов отражения и ЭО позволяет определить толщины обоих барьеров и КЯ.

Количественный анализ проводился с использованием метода матриц переноса для слоистых систем [7] и ДФ

квантовой ямы, которая рассчитывалась как функция напряжения, приложенного к структуре, в соответствии с методикой, описанной в разд. 3. Спектры ЭО ($\Delta R/R$) находились из спектров отражения для двух приложенных к структуре напряжений (V_1 и V_2) согласно выражению

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{2} \frac{R(V_1) - R(V_2)}{R(V_1) + R(V_2)}, \quad (1)$$

где $R(V_1)$ и $R(V_2)$ — отражение структуры при напряжениях $V_1 = U_{dc} - U_{mod}$ и $V_2 = U_{dc} + U_{mod}$ соответственно. Спектры рассчитывались в предположении, что для всех шагов травления, начиная с первого, структура состоит из полубесконечной подложки GaAs, нижнего (толщина d_1) и верхнего (d_2) барьеров $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и КЯ между ними. Содержание Al в барьерах было получено из усреднения данных подгонки спектров электроотражения для всех шагов травления в спектральной области, соответствующей краю поглощения объемного $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Оно оказалось несколько разным ($x = 0.316$ для нижнего барьера и $x = 0.308$ для верхнего). Однако это различие не имеет существенного влияния на энергии оптических переходов и ДФ квантовой ямы, и в дальнейшем мы использовали одинаковое значение $x = 0.312$ для обоих барьеров. Для расчета использовались оптические константы GaAs и AlGaAs из [19], которые считались независимыми от величины электрического поля в структуре, и показатель преломления электролита, равный 1.41.

Суммарная толщина барьеров ($d_1 + d_2$) после каждого травления определялась путем подгонки рассчитанных спектров отражения к экспериментальным (см. рис. 2, а). Для первого шага травления получено $(d_1 + d_2) = 362$ нм. Затем, удерживая суммарную толщину постоянной и перераспределяя ее между верхним и нижним барьерами, нашли наилучшее соответствие расчетного и экспериментального спектров электроотражения для первого травления в спектральной области

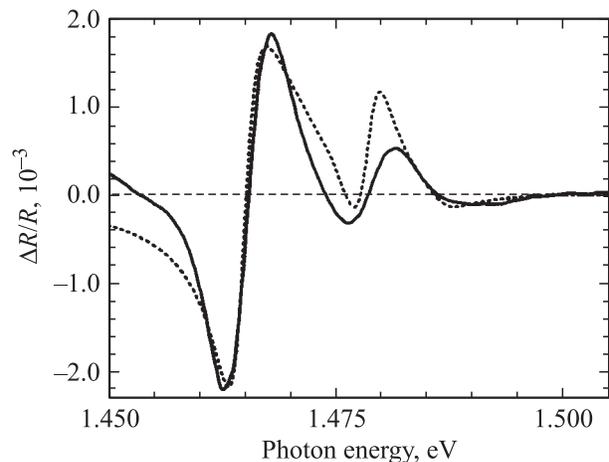


Рис. 4. Спектры электроотражения в области переходов hh_1E_1 и lh_1E_1 после 1-го травления. Сплошной линией обозначен эксперимент, пунктирной — расчет.

Таблица 2. Толщина Al_xGa_{1-x}As-барьера на каждом шаге травления

Шаг травления	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$d_1 + d_2$ (нм)	362.0	342.3	322.7	301.9	279.3	233.9	202.7	181.3	155.1
d_2 (нм)	204.5	184.8	165.2	144.4	121.8	76.4	45.2	23.8	–

переходов в КЯ. Другими подгоночными параметрами являлись ширина КЯ, разрыв зон, уширение оптических переходов и сила осциллятора для перехода hh_1E_1 . Было установлено, что наилучшее соответствие достигается при толщинах верхнего и нижнего барьеров $d_2 = 204.5$ и $d_1 = 157.5$ нм, ширине КЯ, равной 9.61 нм, и отношении разрыва зоны проводимости и валентной зоны, равном 75/25. Сравнение рассчитанного и экспериментального спектров электроотражения в области двух первых переходов в КЯ представлено на рис. 4.

Используя найденную толщину верхнего барьера после 1-го шага травления ($d_2 = 204.5$ нм) и суммарную толщину барьеров на каждом из шагов травления, полученную из подгонки спектров отражения (вторая строка табл. 2), определили толщину верхнего барьера для всех шагов травления. Эти данные приведены в третьей строке табл. 2. С помощью этих параметров, были рассчитаны спектры электроотражения для каждого шага травления и установлено хорошее согласие с экспериментом. Отметим, что указанные выше значения параметров КЯ подтверждаются для всех шагов травления, а рассчитанные спектры электроотражения обнаруживают осциллирующее поведение в зависимости от толщины верхнего барьера. На рис. 5 показано это поведение для энергии фотона 1.465 эВ. Видно, что экспериментальные точки, считанные с экспериментальных спектров при этой же энергии фотона (см. рис. 3,

вертикальная пунктирная линия), хорошо ложатся на расчетную кривую. Отклонение двух последних точек (7-й и 8-й шаги травления) от расчетной зависимости связано с резким уменьшением эффективности модуляции электрического поля в КЯ при малой толщине верхнего барьера. Можно предполагать, что этот эффект обусловлен наличием поверхностного заряда на границе с электролитом, не учтенным в расчете.

5. Заключение

Мы провели исследование структуры GaAs/AlGaAs с одиночной квантовой ямой методами электроотражения и отражения при комнатной температуре. Сравнение с расчетом позволило нам провести идентификацию переходов и определить параметры квантовой ямы (ширину квантовой ямы, значения разрыва зон, содержание алюминия в барьерах), а также толщину каждого из барьерных слоев. Данная методика может быть использована как неразрушающий метод контроля структур с квантовыми ямами.

В заключение авторы выражают благодарность М. Henini и М. Chamberlain за предоставление образцов для измерений, D. Johnston, В. Feldmann и N. Stein за участие в экспериментах, V. Nakov за помощь в проведении расчетов и R. Goldhahn за многократные обсуждения.

Список литературы

- [1] A.J. Shields, P.C. Klipstein. Phys. Rev. B, **43**, 9118 (1991).
- [2] A.F. Terzis, X.C. Liu, A. Petrou, B.D. McCombe, M. Dutta, H. Shen, Doran D. Smith, M.W. Cole, M. Taysing-Lara, P.G. Newman. J. Appl. Phys., **67**, 2501 (1990).
- [3] R. Ferrini, M. Geddo, G. Guizzetti, M. Patrini, S. Franchi, C. Bocchi. Phys. Rev. B, **59**, 15395 (1999).
- [4] D.Y. Li, S.H. Liang, Y.S. Huang, K.K. Tiong, Fred H. Pollak, K.R. Evans. J. Appl. Phys., **85**, (1999).
- [5] Y. Fu, M. Willander, Z.L. Miao, W. Li. J. Appl. Phys., **89**, 3138 (2001).
- [6] A. Herasimovich, S. Shokhovets, R. Goldhahn, G. Gobsch. Thin Sol. Films, **450** (1), 199 (2004).
- [7] М. Борн, Э. Вольф. *Основы оптики* (М., Наука, 1970) с. 77.
- [8] G. Bastard. Phys. Rev. B, **24**, 5693 (1981).
- [9] M.G. Burt. Appl. Phys. Lett., **65**, 717 (1994).
- [10] M. Altarelli, U. Ekenberg, A. Fasolino. Phys. Rev. B, **32**, 5138 (1985).

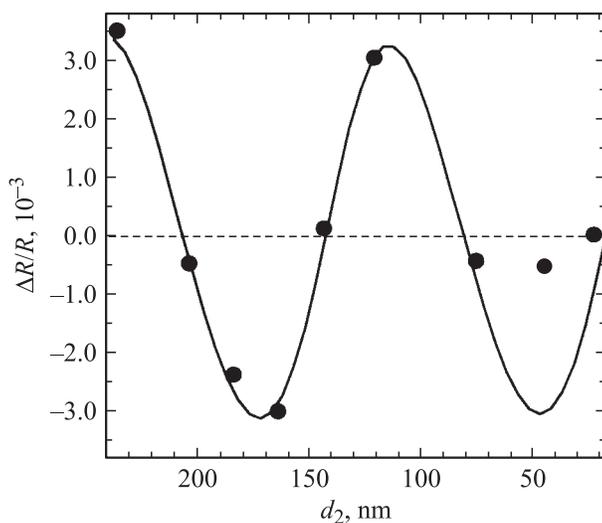


Рис. 5. Расчетная (сплошная линия) и экспериментальная (точки) зависимости амплитуды сигнала электроотражения на энергии фотона 1.465 эВ от толщины верхнего барьера.

- [11] D.A. Broido, L.J. Sham. Phys. Rev. B, **34**, 3917 (1986).
- [12] A. Twardowski, C. Hermann. Phys. Rev. B, **35**, 8144 (1987).
- [13] D. Ahn, S.-L. Chuang. IEEE J. Quant. Electron., **26**, 13 (1990).
- [14] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. J. Appl. Phys., **89**, 5815 (2001).
- [15] D.S. Chemla, D.A.B. Miller, P.W. Smith, A.C. Gossard, W. Wiegmann. IEEE J. Quant. Electron., **20**, 265 (1986).
- [16] E.H. Li, B.L. Weiss, K.S. Chan. IEEE J. Quant. Electron., **32**, 1399 (1996).
- [17] S.L. Chuang. *Physics of Optoelectronic Devices* (N.Y.–Chichester–Brisbane–Toronto–Singapore, John Wiley & Sons, Inc., 1995) p. 385.
- [18] D. Ahn, T.-K. Yoo. IEEE J. Quant. Electron., **29**, 2864 (1993).
- [19] C.C. Kim, J.W. Garland, P.M. Raccah. Phys. Rev. B, **47**, 1876 (1993).

Редактор Л.В. Беляков

Room-temperature electroreflectance and reflectance of a GaAs/AlGaAs single quantum well structure

A.A. Herasimovich⁺, S.V. Shokhovets*⁺, G. Gobsch⁺, D.S. Domanevsky**

* Belarusian National Technical University,
220100 Minsk, Belarus

⁺ Institute of Physics, Ilmenau Technical University,
98684 Ilmenau, Germany

Abstract Electroreflectance and reflectance of a GaAs/AlGaAs single quantum well structure at room temperature were studied. We observed an oscillatory behavior of the electroreflectance signal in dependence on the thickness of AlGaAs top barrier layer. Experimental data are analyzed using the dielectric function of the quantum well and the transfer matrix method for multilayer systems which allows us to determine parameters of the quantum well and barrier layers.