

毕业论文题目：非周期层状介质中的声传播和半导体超晶

## 格的非线性光学性质

理论物理专业九一硕士研究生姓名：董航

指导教师（姓名，职称）：熊诗杰，研究员

### 摘要

本文主要研究非周期层状介质中的声传播和半导体超晶格的非线性光学性质。全文分为两部分：

第一部分：在连续理论的基础上，利用转移矩阵方法，我们计算了在周期无序的层状介质中，沿晶格生长方向的横向弹性声波的体波态密度和穿透系数。结果表明，体波的态密度受到层厚随机度的强烈影响，由于层厚是随机的，绝大多数波被局域在某些垂直于晶格生长方向的平面内，穿透系数为零，但仍有一些频率的波完全不被散射。据此，我们给出了一些特殊的随机层厚的层状结构，可以解析地决定那些可完全穿过这些结构的波的频率，为制造高质量的声波滤波器提供了可能性。

第二部分：考虑到非抛物形的能带结构以及周期间的耦合，我们计算了特殊结构的GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 超晶格的三重共振的三阶非线性极化率。这种超晶格由无限个重复周期构成，每个周期中含有限数目的层厚各异的GaAs层和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层，其层厚是特意设计的，以使得各能带间的间距基本相等。计算结果表明，周期间的耦合对三阶极化率影响很大。与以前的关于三阶极化率的报道相比，在一定的结构下三阶极化率的数值能提高两个数量级，在非线性的光学器件中有一定的应用前景。最后我们讨论了增大三阶极化率的可能方法。

**THESIS:(I) Acoustic properties of a layered medium with randomly distributed layer thickness  
(II) third-order nonlinear susceptibility in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As superlattice with special layered structure**

SPECIALIZATION:Theoretical physics

POSTGRADUATE:Hang Dong

MENTOR:Shijie Xiong

Part one: We study here the acoustic properties of a layered medium with randomly distributed layer thicknesses. The propagation of transverse elastic waves along the direction parallel to the laminations is investigated. The phononic spectra and the transmissions for such waves are calculated. It is found that the density of states is drastically affected by the extent of disorder of such a system. Owing to the randomness, most of the waves are localized in the direction perpendicular to the laminations, but there still exist some waves with special frequencies which are completely extended. In some special cases we can analytically determine the frequencies of these extended waves. On basis of this calculation a possible application of such structures is suggested.

Part two: By taking into account the non-parabolic band structure of the constituents and the coupling between the periods, we calculated the triply resonant nonlinear susceptibility in a specially designed GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub> superlattice. It consists of infinite repeated periods, each of which is an alternative stacking of GaAs and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As with special layer thickness, designed in such way that the minibands of the superlattice are nearly equal-separated. The triply resonant susceptibility is produced by a three-photon process. In some case the coupling between the periods may slightly enhance the magnitude of third-order susceptibility. The possible ways of maximizing the nonlinear susceptibility of the superlattice are also discussed.

## 目 录

### 第一部分：非周期层状介质中的声传播

- 一、超晶格声学性质及一维无序系研究现状
- 二、基本理论与公式
- 三、有限厚度样品中的体波态密度
- 四、穿透系数
- 五、结论与讨论
- 六、参考文献

### 第二部分：半导体超晶格的非线性光学性质

- 一、半导体超晶格非线性光学性质研究现状
- 二、基本公式与超晶格结构
- 三、数值计算结果
- 四、关于结果的讨论
- 五、参考文献

## 第一部分：非周期层状介质中的声传播 [1]

### 一、超晶格声学性质及一维无序系统的研究现状

近年来，关于异质结构、多层结构和超晶格中的各种振动模式的研究引起了广泛的兴趣。基于连续理论的理论研究表明 [2-6]，超晶格中两种声学性质不同的介质在晶格生长方向 ( $x$  方向) 上的周期迭代，对沿该方向传播的弹性声波有着重要影响。由于人工的周期性，沿  $x$  方向传播的弹性声波的色散曲线都被折叠在超晶格的小布里渊区里，而禁带则发生在色散曲线的中间或两端。利用 Raman 散射等方法进行的关于各种金属、半导体、非晶材料超晶格的声子谱的实验研究证实了上述理论结果 [7-11]。另一方面，用转移矩阵方法进行的关于半导体超晶格<sup>中</sup>的弹性波的穿透系数及反射系数的研究，也得到了实验证实。[5] 同时，近年来，人工制造的非周期层状结构也引起了大家的注意。这些结构包括准周期系统和层厚随机变化的系统。在这些系统中，在平行于层面的方向上，仍保持着晶格周期性，但在晶格生长方向上则出现了一维准周期性或

无序性。对于确定的平行波矢分量，弹性波沿生长方向的传播，恰似在一维非周期系统中电子或声子的运动。人们早已发现，电子能谱在一维准周期系统中具有类康托集合的性质[1]，同时标度理论表明，在一维无序系统中，大多数电子态是局域的[3]，但仍有一些特殊的无序结构，在其中存在少数的扩展态[4]。这些性质同样也应该反映在弹性波的传播中。

随机层厚的层状结构的性质为制造新器件提供了另一种可能性。通过控制层厚的无序度以及改变掺杂的程度，我们可以控制其声学性质。这样制出的新材料，其声学性质完全不同于大块晶体或周期性的超晶格。我们期望能找到一种无序结构，它只容少数特殊频率的波通过，而完全散射其它波，以用于制造高质量的滤波器。

我们用转移矩阵方法计算了由A、B两种介质组成的具有随机层厚分布的层状结构的体波态密度及穿透系数。我们发现体波态密度受层厚无序程度影响很大。另外，由于层厚的随机

性，大多数波是局域的，然而在一些特殊情形下，有一些频率的波可完全不被散射，这些波的频率可以解析地决定，从而具有一定的应用前景。

## 二. 基本理论与公式

我们考虑的超晶格由两种声学性质不同的物质构成，其层厚在一定范围内是随机分布的，因此每层的物质的层厚是一个无规数。我们定义  $P_A(l_A)$  和  $P_B(l_B)$  作为随机函数来描述物质 A 与物质 B 的层厚分布，采取如下形式：

$$P_{A(B)}(l_{A(B)}) = \begin{cases} \frac{1}{\delta_{A(B)}} & \bar{l}_{A(B)} - \frac{1}{2}\delta_{A(B)} \leq l_{A(B)} \leq \bar{l}_{A(B)} + \frac{1}{2}\delta_{A(B)} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (1)$$

其中  $\bar{l}_{A(B)}$  是物质 A(B) 的平均层厚， $\delta_{A(B)}$  是其层厚变化的范围，下标 A 和 B 表明物质的种类。根据这一分布函数，样品中每一层的厚度可在计算机上用随机数发生器得出。一经产生，以后的计算俱以之为基础。

对于横向弹性波的传播，层 A(B) 的弹性性质是由其密度  $\rho_{A(B)}$  与横波声速  $C_{A(B)}^+$  来表征的。

我们假定层面垂直于  $x_1$  方向，横向弹性波的位移沿  $x_1$  方向，平行于层面，于是该波的传播在  $x_1-x_3$  面内。在某一层的运动方程为：

$$\ddot{u}(x_1, x_3, t) = (C_{A(B)}^+)^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) u(x_1, x_3, t) \quad (2)$$

其中  $u$  是  $(x_1, x_3)$  点在时间  $t$  的位移。不失一般性，我们认为波在  $x_3$  方向具有平面波的形式，则方程 (2) 的解可表为：

$$u(x_1, x_3, t) = \exp[i(k_3 x_3 - \omega t)] u(x_1) \quad (3)$$

$$u(x_1) = A_i \sin[\alpha_i(x_1 - x_{1i})] + B_i \cos[\alpha_i(x_1 - x_{1i})]$$

这里坐标  $x_1$  处在第  $i$  层内，而  $x_{1i}$  是第  $i$  层和第  $(i-1)$  层的界面的坐标， $k_3$  是波矢沿  $x_3$  方向的分量，且有：

$$\alpha_i = \left[ (\omega/c_i^+)^2 - k_3^2 \right]^{1/2}$$

其中当  $i$  层物质为 A 时， $c_i^+ = c_A^+$ ；当  $i$  层物质为 B 时， $c_i^+ = c_B^+$ 。 $\omega$  为声波频率。

在第  $i$  层和第  $(i+1)$  层的界面处的位移和应力的连续性条件要求：

$$A_i \sin(\alpha_i l_i) + B_i \cos(\alpha_i l_i) = B_{i+1} \quad (4)$$

$$F[A_i \cos(\alpha_i l_i) - B_i \sin(\alpha_i l_i)] = A_{i+1} \quad (5)$$

$$F = \alpha_i \rho_i (c_i^+)^2 / \alpha_{i+1} \rho_{i+1} (c_{i+1}^+)^2 \quad (6)$$

而  $\rho_i$  和  $l_i$  分别是第  $i$  层的厚度和密度。同样，在第  $i+1$  层与第  $i+2$  层的界面有连续性条件：

$$B_{i+2} = A_{i+1} \sin(\alpha_{i+1} l_{i+1}) + B_{i+1} \cos(\alpha_{i+1} l_{i+1}) \quad (7)$$

$$F A_{i+2} = A_{i+1} \cos(\alpha_{i+1} l_{i+1}) - B_{i+1} \sin(\alpha_{i+1} l_{i+1}) \quad (8)$$

方程 (4)、(5)、(7)、(8) 可合并成转移矩阵形式：

$$\begin{bmatrix} A_{i+2} \\ B_{i+2} \end{bmatrix} = T_i \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix} \quad (9)$$

其中  $T_i$  为  $2 \times 2$  矩阵：

$$T_i = \begin{bmatrix} \cos(\alpha_{i+1} l_{i+1})/F & -\sin(\alpha_{i+1} l_{i+1})/F \\ \sin(\alpha_{i+1} l_{i+1}) & \cos(\alpha_{i+1} l_{i+1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \cos(\alpha_i l_i) & -F \sin(\alpha_i l_i) \\ \sin(\alpha_i l_i) & \cos(\alpha_i l_i) \end{bmatrix} \quad (10)$$

由于样品由 A、B 两种物质交叠而成，所以第  $i$  层与第  $i+2$  层为同一种物质，故矩阵  $T_i$  为一模为 1 的矩阵。现在考虑一个  $2N$  层的样品，其第  $2N$  层与第一层都与同样的媒质相连，则波在第一层与媒质（第  $2N+1$  层）中的振幅有如下关系：

$$\begin{pmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{pmatrix} = T_{\text{total}} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$T_{\text{total}} = \prod_{i=1}^N T_{2i-1}$$

由这个方程，再利用样品两端的边界条件，

我们即可计算声子谱与穿透系数。

### 三、有限样品中的体波态密度

层厚的随机性破坏了生长方向上的周期性，所以计算声子谱时不能应用 Bloch 定理。因此，只能考虑有限长度的样品。这样，某些在无限样品中可能出现的模式，会由于截断而消失，因为这些模式所依赖的长程结构比样品的厚度还长。另一方面，由于截断产生了一些与样品两表面有关的振动模式，这些振动模式依赖于我们对边界条件的处理。实际上，我们对这些表面模式并不关心，我们在本文中要找的是能在整个样品中传播的振动模式，即所谓的体波。这就要求在样品的两端波的振幅的比值为有限大小。类似于研究准晶中的标准方法 [16-17]，我们对两个表面的振幅采用 Bloch 假定：

$$\begin{bmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{bmatrix} = \exp(iKL) \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

其中  $K$  是 Bloch 波矢，表征周期性的边界条件，

$$L = \sum_{i=1}^{2N} l_i$$

是样品的总厚度。根据方程(11)与(12)，我们有：

$$T_{total} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \exp(iKL) \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}$$

在这个关于  $A_1$ 、 $B_1$  的方程组中，利用其有非零解的条件，再考虑到  $T_{total}$  的模为 1，我们得到：

$$\chi \equiv \frac{1}{2} \text{Tr}(T_{total}) = \cos(KL) \quad (13)$$

或

$$|\chi| \leq 1 \quad (14)$$

由于  $\chi$  依赖于声波频率，所以从这个方程我们便可得到系统的弹性波的声子谱，所得结果是满足方程(14)的一系列子带，这些带的出现是由于 Bloch 假设。当  $N \rightarrow \infty$  时，子带的宽度趋近于 0。我们计算态密度时， $N$  取得足够大，从而子带的宽度与频率的分辨率有同样的量级，可以把一个子带看作一个声子态，该态的频率取在该子带的中央。这样来计算一定频率间隔内态的数目，从而得到了作为频率函数的态密度。在图 1(a)、图 1(b) 中我们给出了层厚随机度不同的样品的态密度，作为比较，还在图 1(c) 中给

出了用上述方法得到的周期性样品的态密度而没有利用周期对称性。所有样品平均层厚均为1000Å,总层厚为200层,用以计算的物质是Nb和Cu,其弹性性质在表一中列出。

表一 样品A与B的 $\rho$ 及 $c^+$

	$\rho$ ( $g/cm^3$ )	$c^+$ ( $10^5 cm/s$ )
A	8.57	1.83
B	8.92	2.905

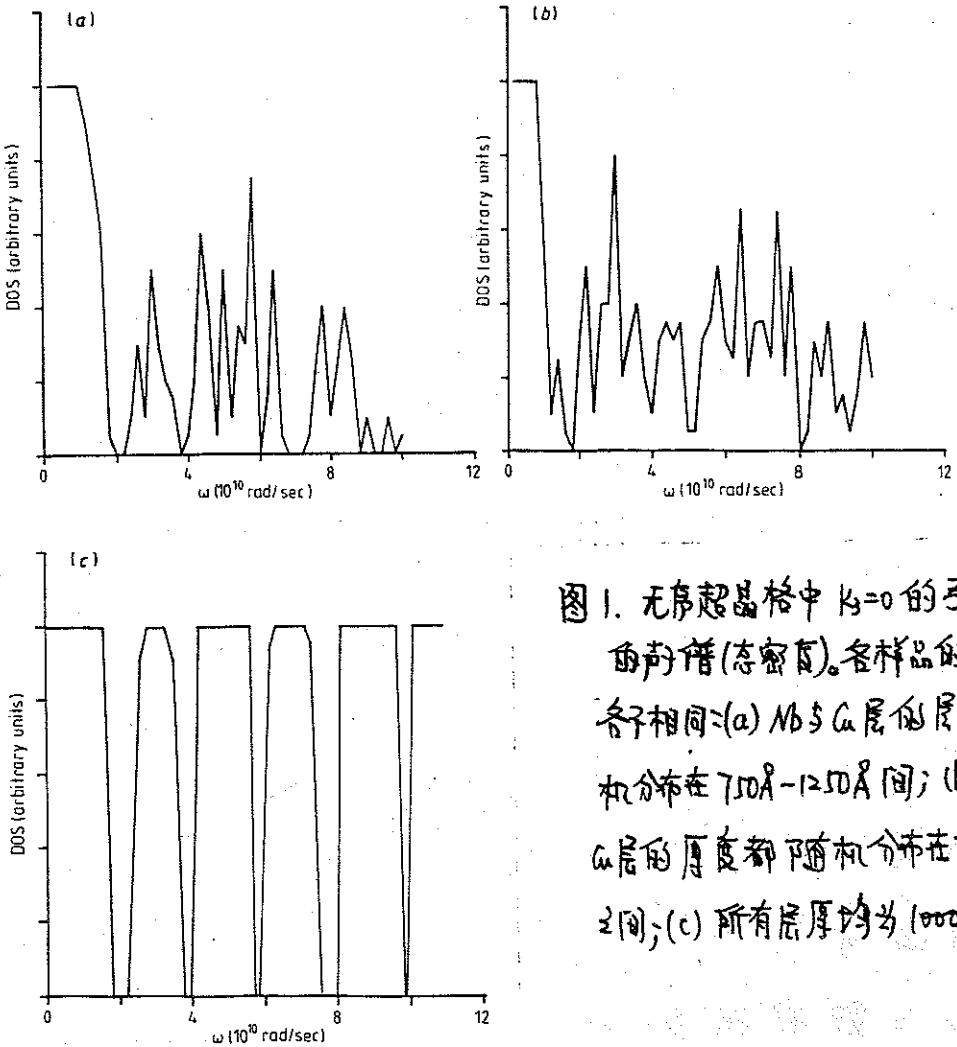


图1. 无序超晶格中 $k_3=0$ 的弹性声波的声谱(态密度)。各样品的无序程度各不相同:(a) Nb与Cu层的层厚都随机分布在700Å-1200Å间;(b) Nb层与Cu层的厚度都随机分布在250Å至1700Å间;(c) 所有层厚均为1000Å。

从图中可以看出，在图1(c)中的有序样品的带结构在图1(a)、图1(b)中都被随机性破坏了，在带中的某些态在无序样品中消失了，而在对应有序样品的禁带的频率中，在无序样品中却出现新的态。这种效应在高频段尤其明显。在图1(a)、图1(a)中的低频段上还残存一些带结构。当无序度增加时，声子谱变得更加离散。

对有限厚度的样品，我们也可应用其它边界条件，比如样品=表面的应力为零，于是：

$$A_1 = A_{2N} \cos(\alpha_{2N} l_{2N}) - B_{2N} \sin(\alpha_{2N} l_{2N}) = 0 \quad (15)$$

这意味着：

$$\begin{bmatrix} A_{2N+1} \\ B_{2N+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ B_{2N+1} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ B_1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

再联立方程(11)，利用存在非零解的条件，可以得到

$$[T_{total}]_{12} = 0 \quad (17)$$

从这个方程也可求解声子谱。满足该方程的解中包含一些前一解法中未包含的表面波，也包括导致  $B_1$  与  $B_{2N+1}$  之比值为有限的体波。如果令  $B_1/B_{2N+1} = 1$ ，则得到的体波解包含在用 Bloch 假定

所得的子带中。当  $N \rightarrow \infty$  时, 表面的影响被消除了, 于是用两种边界条件所得的结果将完全相同。

#### 四. 穿透系数

当声波沿这样的无序样品传播时, 在沿晶晶格生长的方向上, 波的振幅是随空间而变化的, 研究波的振幅随空间的变化是件有意思的工作, 尤其是关于波对这种样品的穿透系数的研究, 将有助于我们对这种材料的了解与应用。我们考虑将以上提及的样品植于大块的 C 材料中, 且假定入射波的波矢在  $x_1-x_3$  面内, 波的极化仍在  $x_2$  方向, 于是在体材料的左半部分和右半部分的  $u(x_1)$  可记为:

$$u(x_1) = \begin{cases} \exp[ik_{10}(x_1 - x_{10})] + \gamma \exp[ik_{10}(x_1 - x_{10})] & x_1 \leq x_{10} \\ t \exp[ik_{10}(x_1 - x_{1,2N})] & x_1 \geq x_{1,2N} \end{cases} \quad (18)$$

其中  $x_{10}$  和  $x_{1,2N}$  分别为样品左端和右端的坐标,  $k_{10}$  为波矢沿  $x_1$  方向的分量。方程  $u(x_1)$  在样品中的部分仍由方程 (9) 表示。由于频率  $\omega$  与波矢在  $x_3$  方向的分量  $k_3$  在样品内外为一样的, 故有:

$$k_{10} = [(\omega/c^+)^2 - k_3^2]^{1/2} \quad (19)$$

其中  $c_c^+$  为在物质  $c$  中的横波声速。由在样品两个表面的位移与应力连续性，我们有：

$$A_1 = i(1-\gamma)F_1 \quad (20)$$

$$B_1 = 1 + \gamma \quad (21)$$

$$[A_{2N} \cos(\alpha_{2N} l_{2N}) - B_{2N} \sin(\alpha_{2N} l_{2N})] F_2 = i t \quad (22)$$

$$A_{2N} \sin(\alpha_{2N} l_{2N}) + B_{2N} \cos(\alpha_{2N} l_{2N}) = t \quad (23)$$

其中

$$F_1 = \alpha_c \rho_c (c_c^+)^2 / \alpha_A \rho_A (c_A^+)^2 \quad (24)$$

$$F_2 = \alpha_B \rho_B (c_B^+)^2 / \alpha_c \rho_c (c_c^+)^2$$

又从方程 (7)-(11) 得到

$$\begin{bmatrix} A_{2N} \cos(\alpha_{2N} l_{2N}) - B_{2N} \sin(\alpha_{2N} l_{2N}) \\ A_{2N} \sin(\alpha_{2N} l_{2N}) + B_{2N} \cos(\alpha_{2N} l_{2N}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} T_{total} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} \quad (25)$$

从方程 (20)-(25)，可以求得：

$$\gamma = [T_{12} + T_{21} F_1^2 + i F_1 (T_{11} - T_{22})] / [T_{11} F_1^2 - T_{12} + i F_1 (T_{11} + T_{22})] \quad (26)$$

$$t = \{F_1 T_{21} (F_1 - 1) + i [F_1 + T_{12} T_{21} (F_1 - 1)]\} / [T_{21} F_1^2 - T_{12} + i F_1 (T_{11} + T_{22})] \quad (27)$$

其中  $T_{ij}$  ( $i, j=1, 2$ ) 是转移矩阵  $T_{total}$  的矩阵元，于是穿透系数为：

$$|t|^2 = \left\{ [F_1 T_{21} (F_1 - 1) (T_{11} + T_{22})]^2 + [2F_1 + T_{12} T_{21} (F_1 - 1)]^2 \right\} / \left\{ [T_{21} F_1^2 - T_{12}]^2 + [F_1 (T_{11} + T_{22})]^2 \right\} \quad (28)$$

显然，它依赖于声波频率  $\omega$  与波矢分量  $k_3$ 。我们设

c 物质为 A，于是  $F_1 = 1$ ，且

$$|H|^2 = 4 / \left[ (T_{11} + T_{22})^2 + (T_{21} - T_{12})^2 \right] \quad (29)$$

由于该样品厚度的随机性，当样品厚度趋于无穷大时，绝大多数的声波的穿透系数为 0。尽管如此，对一些特定的无序结构，有一些特殊频率的波，其穿透系数为 1。其中一个例子，无序超晶格中物质 A 的厚度是随机的，而各层物质 B 的厚度是相同的，即

$$\delta_A \neq 0 \quad \delta_B = 0 \quad (30)$$

于是当波的频率满足关系

$$\alpha_B l_B = m\pi \quad (m=0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (31)$$

时，转移矩阵  $T_i$  可简化为：

$$T_i = (-1)^m \begin{bmatrix} \cos(\alpha_A l_i) & -\sin(\alpha_A l_i) \\ \sin(\alpha_A l_i) & \cos(\alpha_A l_i) \end{bmatrix} \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (32)$$

这意味着整个样品的转移矩阵与长度为  $L$  的整块物质 A 的转移矩阵相同，顶多相差一个负号。其中

$$L = \sum_{i=1}^N l_{2i-1} \quad (33)$$

由于这样的样品处于物质 A 中，因此这些

频率的波穿透系数为 1，而其它的波穿透系数为 0。在图 2 中我们<sup>画出</sup>不同层数样品的穿透系数，其峰值对应于那些完全没被散射的波。可以看出，随层厚的增加，这些峰变得更加尖锐，不满足方程 (3) 的波的穿透系数衰减得很厉害。

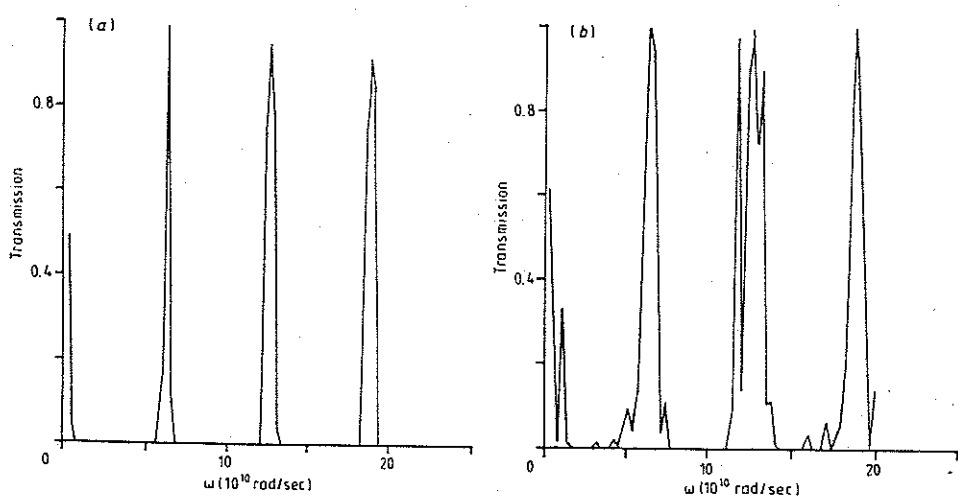


图 2. 波矢分量  $k_x=0$  的横向弹性声波通过无序样品的穿透系数。样品由 Nb 和 Cu 组成，各层 Nb 厚度皆为  $500\text{\AA}$ ，而 Cu 层厚度在  $1000\text{\AA}$  至  $10^5\text{\AA}$  间随机分布，样品处于无限厚的媒质 Nb 中。样品的总层数为 (a) 200；(b) 50。

现在考虑另外一种有更尖锐峰值的无序结构，这种结构的超晶格其层厚如下分布：

$$P_{A(B)}(l_{A(B)}) = \begin{cases} 1/M_{A(B)} & l_{A(B)} = l_{A(B)}^{(0)} + m l_{A(B)}^{(1)} \quad m=1, 2, \dots, M_{A(B)} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (34)$$

若频率满足如下关系

$$\alpha_A l_A^{(1)} = m_1 \pi \quad (35)$$

$$\alpha_B l_B^{(1)} = m_2 \pi \quad (36)$$

(其中  $m_1, m_2$  为整数), 且频率  $\omega$  在层厚为  $l_A^{(1)}$  和  $l_B^{(1)}$  的周期性超晶格的声子谱的子带中时, 可以证明这种波完全不被散射。在这种情况下, 波频需满足 3 个方程, 于是我们可以选择适当的  $l_A^{(1)}, l_B^{(1)}$  去决定所需要的频率。在图 (3) 中我们画出了在这样的系统中声波的穿透系数, 其中取  $k_3 = 0$ 。显然, 对于同样的层厚, 该系统的穿透系数曲线的峰比图 2 所示尖锐得多。

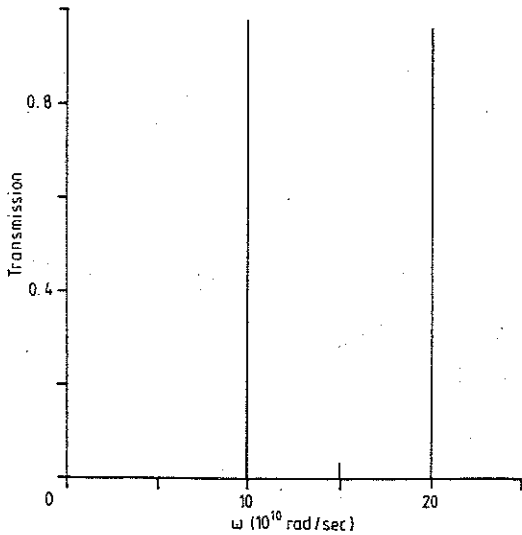


图 3. 弹性声波通过 Nb/Cu 无序超晶格的穿透系数, 其中 Nb 层厚为  $d_1 = 810 \text{ \AA} + 1260m$ , Cu 层厚为  $d_2 = (n+1)1000 \text{ \AA}$ ,  $m, n$  是随机分布在 0 之间的任意整数, 该样品处于无限厚的媒中, 样品总层数为 200 层。

## 五. 讨论

在这一部分我们计算了层厚随机分布的超晶格的声子谱和穿透系数。我们发现在高频段上声子谱对样品层厚的无序程度比较敏感,在这样的系统中有足够的参数可以用来调整其声学性质。关于穿透系数的计算显示出在无序系统中仍存在少数声波是扩展的,它们完全不被散射。这种性质为制造高质量滤波器提供了可能性。需要透过的波的频率以及波峰的宽度可以很容易地通过选择材料的层厚以及层厚分布的随机程度来选择。这些结果对进一步研究这类系统的光学性质也可以提供帮助。

## 六. 参考文献

- [1] Hang Dong and Shijie Xiong, *J Phys: Condens. matter* 5 (1993) 8849
- [2] Canley R E, Djafari-Rouhani B, Dobrzynski and Maradudin A A 1983 *Phys. Rev. B* 27 7
- [3] Tamura S and Wolfe J P 1987 *Phys. Rev. B* 35 2528
- [4] Santos P V, Ley L, Mebert J and Koblinger O 1982 *Phys. Rev. B* 36 4858
- [5] Catellani A and Soba L 1988 *Phys. Rev. B* 38 7717
- [6] Chen R, Lin D L and Geoge T F 1990 *Phys. Rev. B* 41 1435  
Lin D L, Chen R and Geoge T F 1990 *Solid State Commun.* 73 799
- [7] Narayana-murti V, Störmer H L, Chin M A, Gossard A C and Wiegmann W  
1979 *Phys. Rev. Lett.* 43 2012
- [8] Colvard C, Merlin R, Klein M V and Gossard A C 1980 *Phys. Rev. Lett.* 45 298
- [9] Santos P and Ley L 1987 *Phys. Rev. B* 36 3325
- [10] Klein M V, Colvard C, Fischer R and Morkoc T 1984 *I. Physique coll.* 45 C5 131
- [11] Sapriel J, Michel J C, Teledano J C, Vacher R, Kervarec J and Regreny A  
1983 *Phys. Rev. B* 28 2007
- [12] Kohmoto M, Kadanoff L P and Tang C 1983 *Phys. Rev. Lett.* 50 1870
- [13] Dunlap D H, Wu H-L and Phillips P W 1990 *Phys. Rev. Lett.* 65 88
- [14] Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C and Ramakrishnan T V 1979 *Phys. Rev. Lett.* 4
- [15] Dunlap D H, Kundu K and Phillips P W 1989 *Phys. Rev. B* 40 10999
- [17] Kohmoto M, Sutherland B and Tang C 1987 *Phys. Rev. B* 35 1020
- [16] Ostland S and Pandit R 1984 *Phys. Rev. B* 29 1894

## 第二部分：半导体超晶格的非线性光学性质 [1]

### 一、半导体超晶格非线性光学性质研究现状简介

近年来半导体超晶格的非线性光学性质引起了广泛的兴趣。分子束外延等技术为控制超晶格的层厚及掺杂程度提供了可能性，这样就可以控制样品中电子的能带结构和其它性质。许多研究组研究了非对称量子阱的非线性光学性质 [2-7]，这些材料中与中红外区域的带间跃迁有关的大的二阶极化率也有所报道 [2-5]。同时，由于在光信号系统与光子开关方面的可能的应用 [8-9]，关于非对称量子阱的三阶极化率也引起了大家的注意 [6-7]。在文献 (1) 中，多重阱的势和阱的层厚的设计使得该系统有四个等间距的能级，从而使其有很大的三阶极化率 ( $\chi^{(3)}$ )。在他们的研究中，各非对称多重阱是不相关的结构单位，彼此间由很厚的势垒层隔开。

我们研究的是由无限个重复周期构成的超晶格，每个周期都是一个非对称多重阱。在考虑到非抛物形的能带结构以及周期间的耦合

的情况下, 我们计算了  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  超晶格的三阶非线性极化率。周期性的耦合导致两个新情况: (1) 在多重阱中的能级在此扩展为能带, 且只有初态和末态沿晶格生长方向的 Bloch 波矢为相同时, 带间跃迁才可能发生。 (2) 耦合扩展了波函数, 从而改变了带间跃迁矩阵元的大小。我们计算了对应于 Bloch 波矢的能谱和波函数, 利用包络函数方法计算出带间跃迁的矩阵元, 然后求得了三阶极化率  $\chi^{(3)}$ , 发现在我们给定的结构中有很大的  $\chi^{(3)}$  值。

## 二、超晶格结构与有关方程

我们考虑的超晶格, 其周期单元由三层 GaAs 和三层  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  交替迭合而成, 其每层厚度都给过特殊设计, 从而使超晶格有带隙几乎相等的四个导带。在垂直于晶格生长方向的面 ( $x$ - $y$ ) 内, 电子自由运动, 而在生长方向 ( $z$  轴) 上有超晶格势 (即交叉出现的势阱和势垒) 作用于电子。为了研究超晶格的能带结构, 我们采用包络函数近似 [10] 来描述波函数:

$$\psi_{k_{1,2}} = \begin{cases} \{A_{i,u} \cos[q_1(z-z_{i,u})] + B_{i,u} \sin[q_1(z-z_{i,u})]\} \exp(ik_1 y_0) & z_{i,u} + d_{i,u} \geq z \geq z_{i,u} \\ \{C_{i,u} \exp[q_2(z-z_{i,u}-d_{i,u})] + D_{i,u} \exp[-q_2(z-z_{i,u}-d_{i,u})]\} \exp(ik_1 y_0) & z_{i,u} + d_{i,u} + d_{i,u} \geq z \geq z_{i,u} + d_{i,u} \end{cases} \quad (1)$$

其中  $i$  是周期的序数,  $u$  ( $=1, 2, 3$ ) 为每一周期中阱(垒)的序数,  $z_{i,u}$  是第  $i$  个周期中第  $u$  个阱的左端面的坐标,  $d_{i,u}$  与  $d_{i,u}$  分别为第  $u$  个阱和垒的厚度,  $q_1$  与  $q_2$  是能量  $E$  与动量的平行分量的函数:

$$E = \frac{\hbar^2 q_1^2}{2m_1^*} (1 - \gamma_1 q_1^2) + \frac{\hbar^2 k_{1,2}^2}{2m_1^*} \quad \text{在势阱中} \quad (2)$$

$$E = V - \frac{\hbar^2 q_2^2}{2m_2^*} (1 - \gamma_2 q_2^2) - \frac{\hbar^2 k_{1,2}^2}{2m_2^*} \quad \text{在势垒中} \quad (3)$$

其中  $m_1^*$ ,  $m_2^*$  分别为电子在势阱中与势垒中的有效质量,  $\gamma_1$  与  $\gamma_2$  则是反映其能带结构的非抛物形的参数,  $V$  是势垒的高度。因我们只对平行动量较小的带间跃迁感兴趣, 故在平行方向上的能带结构的非抛物形我们没有考虑。下面, 为简单起见, 我们只考虑  $k_{1,2} = 0$  的情形。

方程 (1) 中的四个系数  $A_{i,u}$ ,  $B_{i,u}$ ,  $C_{i,u}$  和  $D_{i,u}$  通过在两表面间的波函数连续条件及匹配条件联系起来:

$$\psi(z) \Big|_{z=z_{i,u}-0^+} = \psi(z) \Big|_{z=z_{i,u}+0^+} \quad \text{对所有 } i \text{ 和 } u \quad (4)$$

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{dy}{dz} \Big|_{z=z_{2u}-0^+} = \frac{1}{m_2^*} \frac{dy}{dz} \Big|_{z=z_{2u}+0^+} \quad \text{对偶数 } u \quad (5)$$

$$\frac{1}{m_2^*} \frac{dy}{dz} \Big|_{z=z_{2u}-0^+} = \frac{1}{m_1^*} \frac{dy}{dz} \Big|_{z=z_{2u}+0^+} \quad \text{对奇数 } u$$

在同一周期中相邻势阱间的波函数的系数的连接条件可用转移矩阵来描述：

$$\begin{pmatrix} A_{i,u+1} \\ B_{i,u+1} \end{pmatrix} = \hat{T}_u \begin{pmatrix} A_{i,u} \\ B_{i,u} \end{pmatrix} \quad (6)$$

其中

$$\hat{T}_u = \begin{pmatrix} T_{u11} & T_{u12} \\ T_{u21} & T_{u22} \end{pmatrix} \quad (7)$$

而

$$\begin{aligned} T_{u11} &= \cos(q_1 d_{1u}) \cosh(q_2 d_{2u}) - S \cdot \sin(q_1 d_{1u}) \sinh(q_2 d_{2u}) \\ T_{u12} &= S \cdot \cos(q_1 d_{1u}) \sinh(q_2 d_{2u}) + \sin(q_1 d_{1u}) \cosh(q_2 d_{2u}) \\ T_{u21} &= \cos(q_1 d_{1u}) \sinh(q_2 d_{2u}) / S - \sin(q_1 d_{1u}) \cosh(q_2 d_{2u}) \\ T_{u22} &= \cos(q_1 d_{1u}) \cos(q_2 d_{2u}) + \sin(q_1 d_{1u}) \sinh(q_2 d_{2u}) / S \end{aligned} \quad (8)$$

$$S = \frac{m_2^* q_1}{m_1^* q_2}$$

如果  $u=3$ ，方程(6)给出了第  $i$  周期最后一层势阱与第  $i+1$  周期第一层阱中波函数系数的连接条件，于是第  $i+1$  周期第一层与第  $i$  周期第一层阱中波函数系数的关系可表述为：

$$\begin{pmatrix} A_{i+1,1} \\ B_{i+1,1} \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} A_{i,1} \\ B_{i,1} \end{pmatrix} \quad (9)$$

其中

$$\hat{T} = \hat{T}_3 \hat{T}_2 \hat{T}_1 \quad (10)$$

同样，由于超晶格的周期性，这些系数还应满足 Bloch 定理：

$$\begin{pmatrix} A_{i+1,1} \\ B_{i+1,1} \end{pmatrix} = \exp(iK_2 d) \begin{pmatrix} A_{i,1} \\ B_{i,1} \end{pmatrix} \quad (11)$$

其中  $d$  是周期单元的总厚度， $K_2$  为  $z$  方向上的 Bloch 波矢。该方程给出了能带的色散关系。如果我们利用初始值：

$$A_0 = 1 \quad B_0 = \frac{\exp(iK_2 d) - T_{11}}{T_{12}} \quad (12)$$

就可求出给定波矢  $K_2$  的波函数。其中  $A_n$  与  $B_n$  并不互相独立，它们必须满足方程 (9) 和 (11)。

在这个基础上，我们便可计算带间跃迁的矩阵元  $\langle \nu | \hat{v} | \nu' \rangle_{K_2}$  了。其中  $\nu, \nu'$  为表标能量的不同子带的下标，且很显然对于不同子带，当  $K_2$  相同时矩阵元才不为 0。三重共振的三阶非线性极化率可用如下公式表述 [1]：

$$\chi_{(\omega)}^{(0)} = \frac{e^2 N_0}{\epsilon_0} \frac{\langle Z \rangle_{12, k_2} \langle Z \rangle_{23, k_2} \langle Z \rangle_{34, k_2} \langle Z \rangle_{21, k_2}}{(\hbar\omega - \Delta E_{12}(k_2) - i\Gamma_{12}) (2\hbar\omega - \Delta E_{23}(k_2) - i\Gamma_{23}) (3\hbar\omega - \Delta E_{34}(k_2) - i\Gamma_{34})} dK_2 \quad (13)$$

其中  $N_0$  是势阱中的电子密度,  $\epsilon_0$  为真空中的介电常数,  $e$  是电子的电量,  $\Delta E_{\nu\nu'}(k_2)$  为子带  $\nu$  与  $\nu'$  中对应同样  $k_2$  的能量差,  $\Gamma_{\nu\nu'}$  为  $\nu \rightarrow \nu'$  间的特征弛豫时间。在下部分我们给出了一些特殊样品的  $|\chi^{(0)}|$  的结果。

### 三. 数值计算结果

我们数值地计算了不同结构的样品的  $|\chi^{(0)}(\omega)|$  值。在这些结构中, 我们选取了四种有较大  $\chi^{(0)}$  值的结构作为代表, 将其结果画在后面的图中。这四种结构为: (a)  $d_{11} = d_{13} = 2.9 \text{ nm}$ ,  $d_{12} = 6.5 \text{ nm}$ ;  $d_{21} = d_{23} = 1.6 \text{ nm}$ ,  $d_{22} = 4.0 \text{ nm}$ ; (b)  $d_{11} = d_{13} = 2.9 \text{ nm}$ ,  $d_{12} = 6.8 \text{ nm}$ ;  $d_{21} = d_{23} = 1.6 \text{ nm}$ ,  $d_{22} = 2.8 \text{ nm}$ ; (c)  $d_{11} = d_{13} = 2.9 \text{ nm}$ ,  $d_{12} = 6.5 \text{ nm}$ ;  $d_{21} = d_{23} = 1.6 \text{ nm}$ ,  $d_{22} = 3.7 \text{ nm}$ ; (d)  $d_{11} = d_{13} = 7.7 \text{ nm}$ ,  $d_{12} = 3.5 \text{ nm}$ ;  $d_{21} = d_{23} = 1.0 \text{ nm}$ ,  $d_{22} = 1.6 \text{ nm}$ 。其中  $d_{1i}$  为势阱厚度,  $d_{2i}$  为势垒厚度。

对于势阱  $\text{GaAs}$  和势垒  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , 我们采用了如下参数 [12]:  $V = f\Delta G$ ,  $f = 0.6$ ,  $\Delta G = 1.435x - 0.9x^2 + 14x^3$ ;  $m_1^* = 0.0665m_0$ ,  $m_2^*/m_0 = 0.0665 + 0.0835\Delta G/1.625$ ; 表征电子能带非抛物形的

参数与阱中电子密度取为 [9]:  $\gamma_1 = 4.9 \times 10^{-19} \text{ m}^2$ ,  
 $\gamma_2 = (m_1^*/m_2^*)^2 \gamma_1$ ,  $N_0 = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 。为简单起见, 对不同的  
标的  $\Gamma_{uv}$  我们都根据文献 [13] 取为  $\Gamma_{uv} = 10 \text{ meV}$ , 最后取  
掺杂浓度  $x = 0.37$ 。

在图 1 中, 我们给出了有结构 (a) 的样品的关于  
Bloch 波矢的色散关系。可以看出, 由于不同周  
期间的耦合, 能级被展宽成了能带。在图 2 中  
我们对各种不同结构的样品都给出了其能带结  
构。我们看到对于具有不同结构的样品, 以及  
同一结构的不同子带, 其能带宽度各不相同。  
一般来说, 样品中的势垒层愈薄, 子带的能量  
越高, 子带的宽度就越宽。在图 3 中我们画出  
的是对应一个特定波矢, 各能级电子的包络函数  
在一个周期中的变化。很明显, 由于超晶格势  
及非抛物形的能带结构, 它与平面波大不一样。  
作为入射光频率  $\omega$  的函数画在图 4 中。比  
较结构 (b) 与结构 (c) 的结果, 可以看出当势垒层较  
薄时,  $R^{(0)}$  值较大, 曲线的峰也变得宽一些。  
其中具有结构 (d) 的样品的  $R^{(0)}$  最大, 是十分有趣的  
现象, 因为它的势垒层最薄, 能带最宽, 这说

周期间的耦合也相对增大  $|X^{(2)}|$  起着重要的作用。由图 (4) 可以看出, 对应于结构 (d) 的样品, 当入射光能量为  $\hbar\omega = 49.8\text{meV}$  时, 其最大的  $|X^{(2)}|$  值为  $|X^{(2)}|_{\text{max}} = 8.01 \times 10^{-12} (\text{m/V})^2$ 。而就我们所知, 以前关于  $|X^{(2)}|$  的报道中, 其最大值为 C. Siratori 等人在 1992 年 [7] 得到的, 为当  $\hbar\omega = 115\text{meV}$  时,  $|X^{(2)}| = 1.3 \times 10^{-14} (\text{m/V})^2$ 。显然我们的结果将其提高了两个数量级, 因而有更好的应用前景。

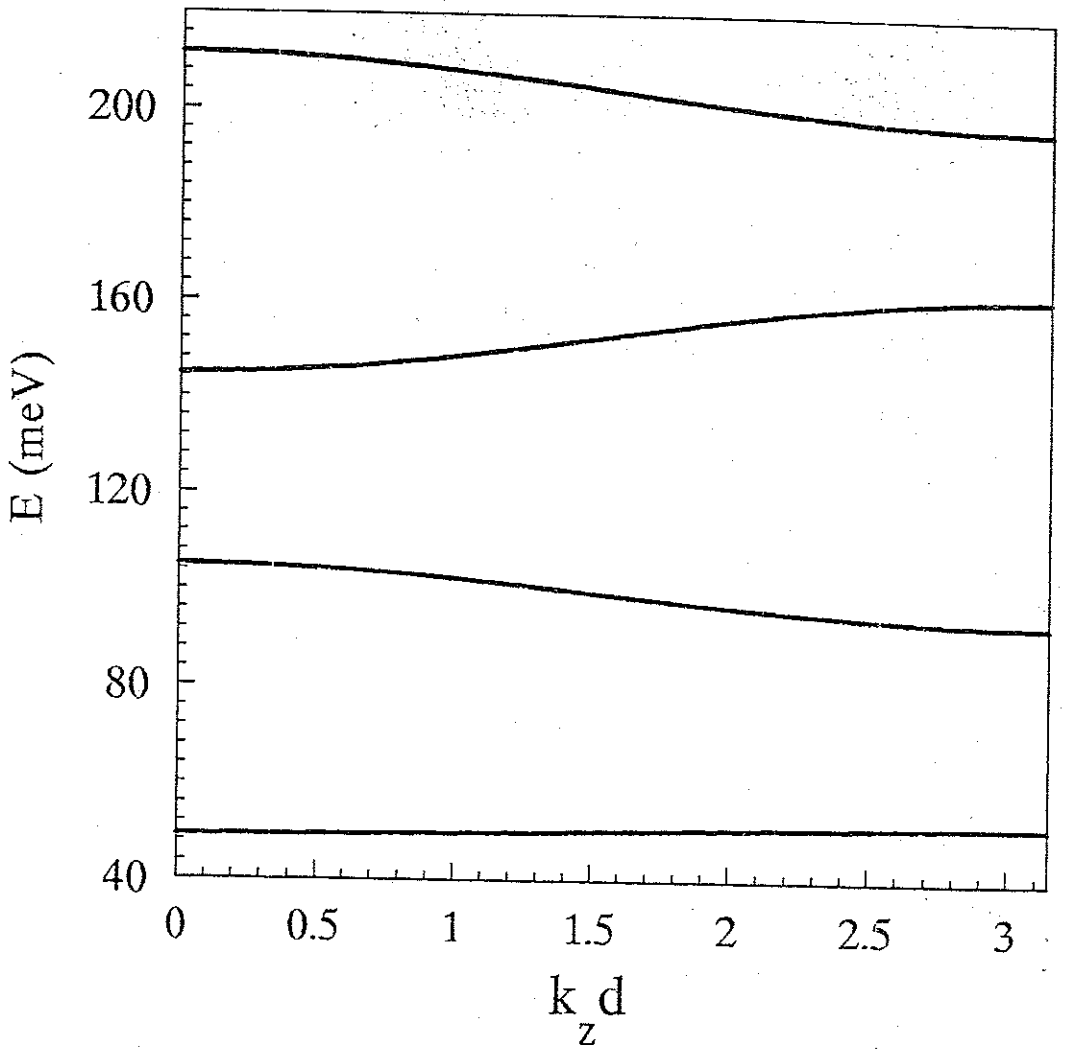


图1. 结构(a)中的色散关系。

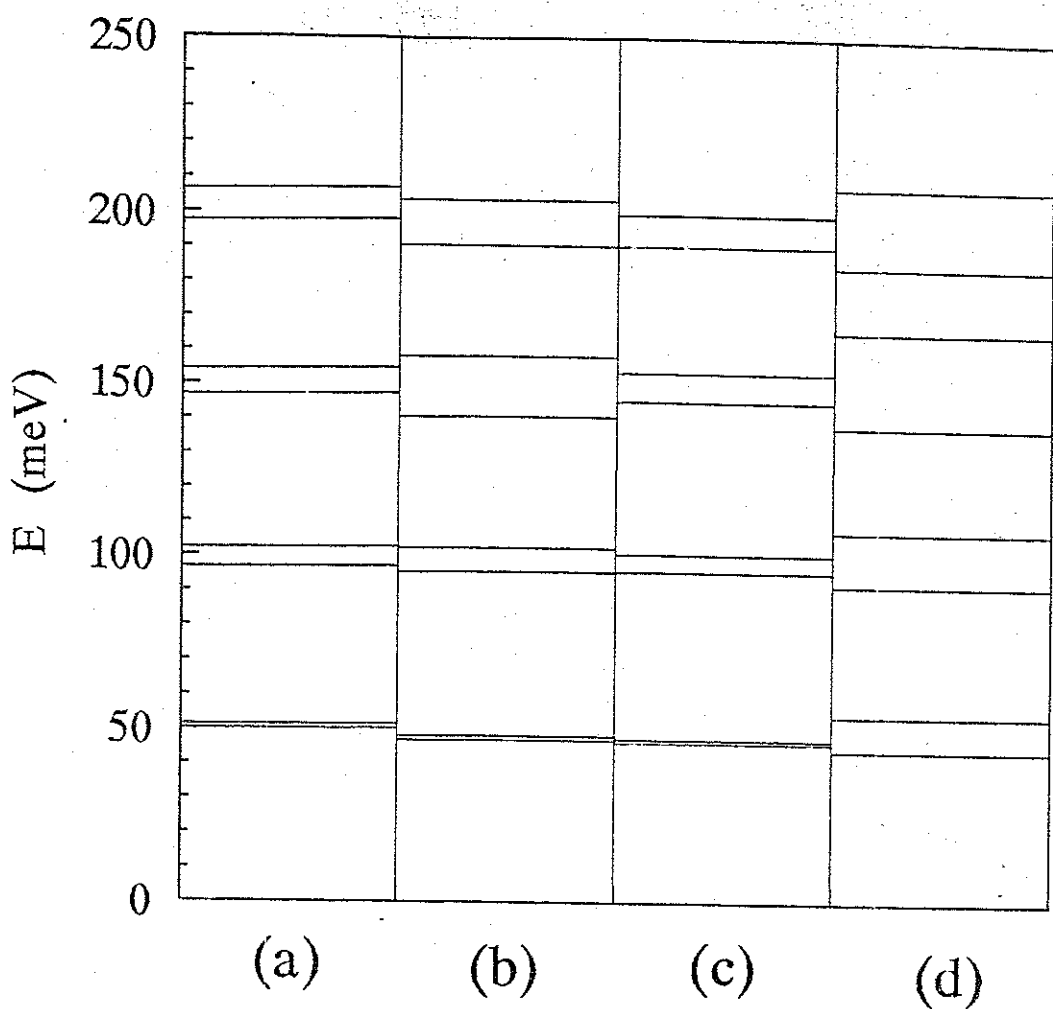


图2. 对应于结构(a)、(b)、(c)、(d)的能带结构

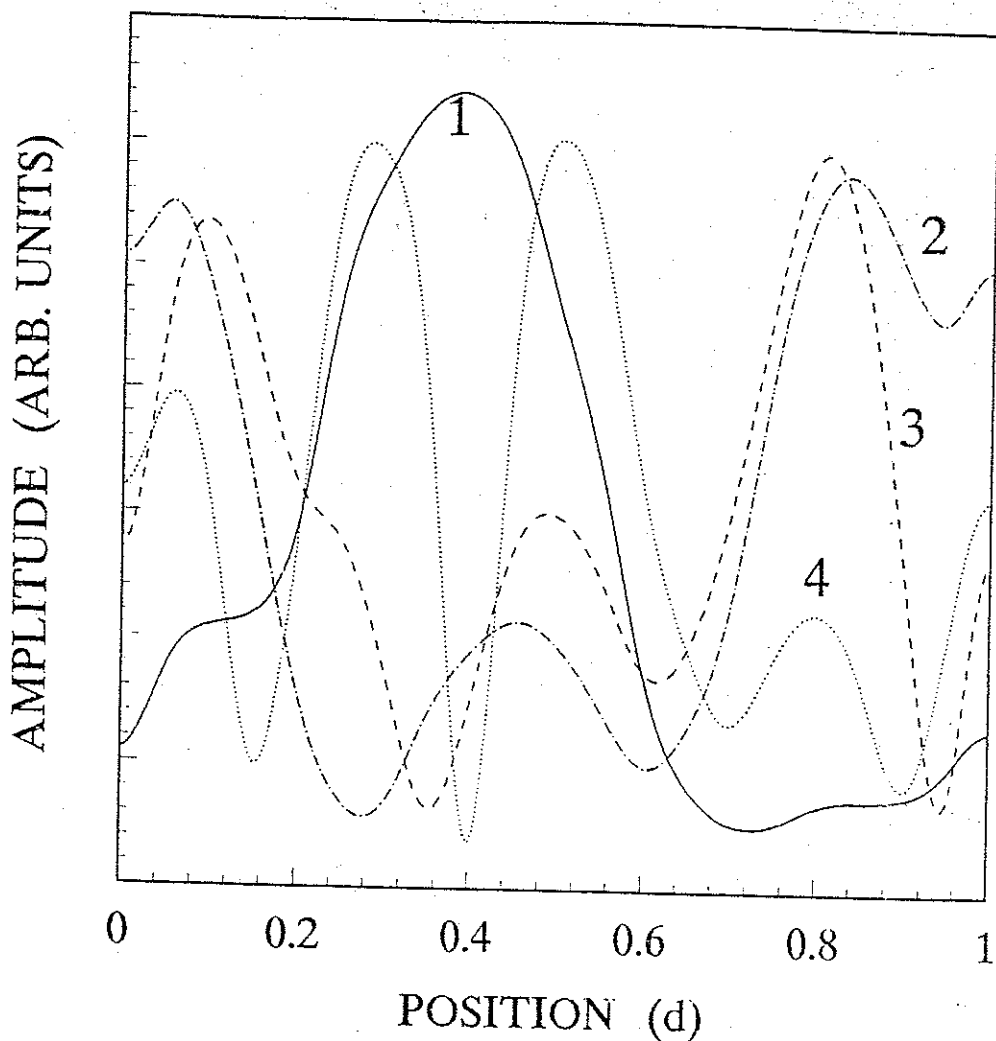


图3. 结构(a)中对应于不同子带的 $k_x=0$ 时的波函数。其中曲线1, 2, 3, 4分别对应于电子能量为50.3meV, 99.4meV, 150.5meV, 201.9meV时波函数在一个周期中沿z方向的变化。

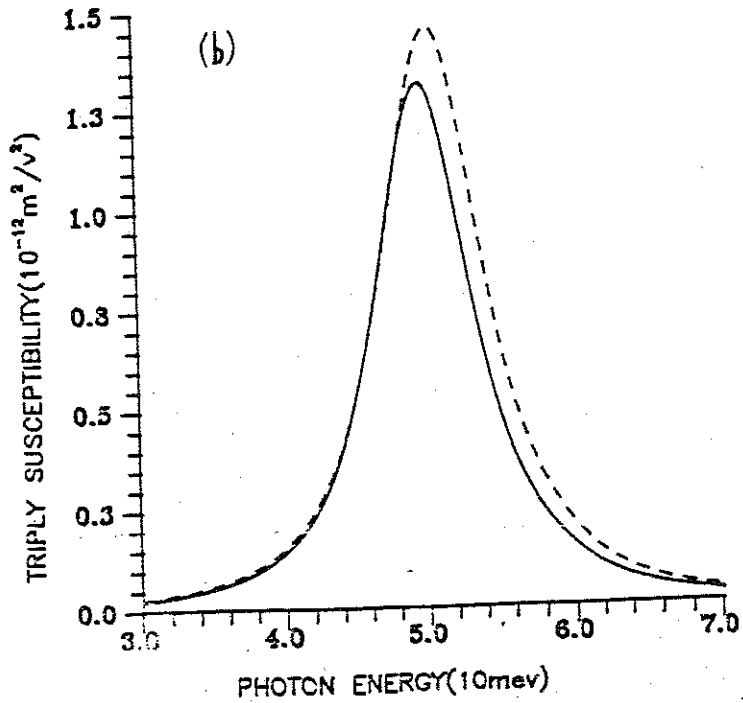
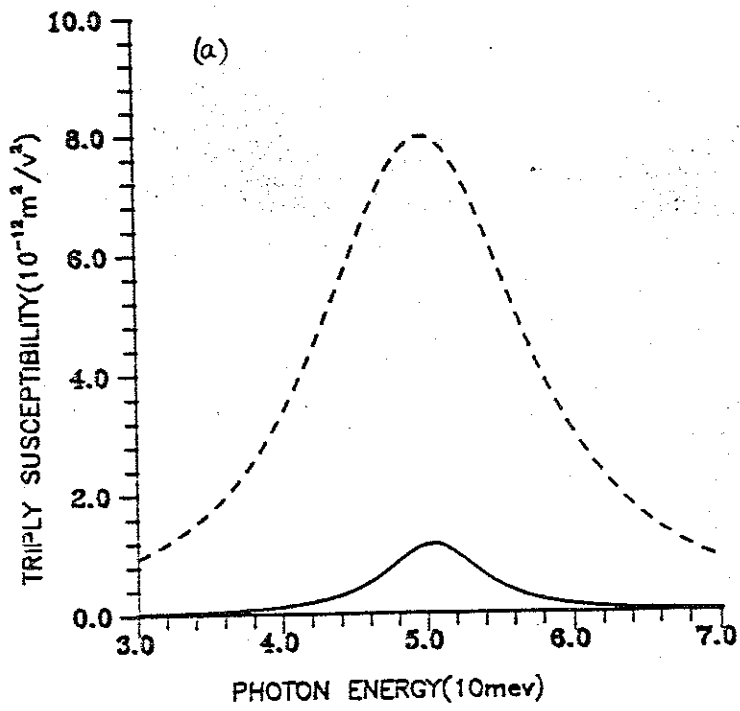


图4. 作为入射光能量函数的 $\chi^{(3)}$ 。其中(a)中的实线对应于结构(a), 虚线对应于结构(d); (b)图中的实线对应于结构(c), 虚线对应于结构(b)。

#### 四、几点讨论

考虑到非抛物形的能带结构以及周期间的耦合，我们计算了在几种特殊结构的超晶格中  $\chi^{(2)}(\omega)$  的绝对值。在这些超晶格中，电子的能带间有几乎相等的带隙，正是这一点极大地增大了  $|\chi^{(2)}|$  值。计算结果表明， $|\chi^{(2)}|$  值对于周期中介质层的层厚变化很敏感，层厚的变化导致了周期间耦合的变化以及能带宽度的变化。在某些情况下能带变宽导致  $|\chi^{(2)}|$  增大，在另外情况下则正好相反。如果要实际应用，则可以通过数值计算来寻找所需要的超晶格的结构。

## 五. 参考文献

- [1] Hang Dong and Shijie Xiong, J. Appl. Phys., to be published.
- [2] M. M. Fejer, J. T. B. Yoo, R. L. Byer, A. Harwit, and J. S. Harris, Jr., Phys. Rev. Lett. 62, 1041 (1989).
- [3] P. Bancaud, F. H. Julien, D. D. Yang, J. M. Lourtioz, E. Rosencher, P. Bois, and J. Nagle, Appl. Phys. Lett. 57, 25 (1990).
- [4] E. Rosencher, P. Bois, J. Nagle, E. Costard, and S. Delaitre, Appl. Phys. Lett. 56, 1822 (1990).
- [5] C. Sirtori, F. Capasso, D. L. Sirvo, S. N. G. Chu, and A. Y. Cho, Appl. Phys. Lett. 59, 230 (1991).
- [6] D. Walrod, S. Y. Auyang, P. A. Wolff, and M. Sugimoto, Appl. Phys. Lett. 59, 2932 (1991).
- [7] C. Sirtori, F. Capasso, D. L. Sirvo, and A. Y. Cho, Phys. Rev. Lett. 68, 1010 (1992).
- [8] L. C. West, Computer 20, 34 (1987).
- [9] H. M. Gibbs, S. S. Tarng, T. L. Jewell, D. A. Winberger, K. Tai, A. C. Gossard, S. L. McCall, A. Passner, and W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 41, 221 (1982).
- [10] G. Bastard, Phys. Rev. B24, 5693 (1981).

- [1] Y. R. Shen, *The Principle of Nonlinear Optics*, Willey, New York,
- [2] D. F. Nelson, R. C. Miller, and D. A. Leinman, *Phys. Rev. B* 35 7770 (1987)
- [3] M. Krahl, J. Christen, and D. Bimberg, in *Gallium Arsenide and Related Compounds 1987: Proceedings of the 14th International Symposium on Gallium Arsenide and Related Compounds*, ed. by A. Christou and H. S. Rupprecht, Heraklion, Crete, 1987, p. 411.