

# 不同形状量子阱的量子限制效应\*

张哲民<sup>1</sup> 陈维友<sup>2</sup> 刘式墉<sup>2</sup> 黄德修<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 华中理工大学光电子工程系 武汉 430074

<sup>2</sup> 集成光电子学国家重点联合实验室吉林大学实验区 长春 130023)

**提要** 采用差分法求解有效质量方程, 考虑轻重空穴的混合效应及应变效应, 对三种不同形状的量子阱的能带结构、价带态密度、跃迁矩阵元进行了比较。在阱宽相同的条件下, 方阱有最大的限制能力, 但抛物阱和三角阱有更平坦的态密度曲线, 使得以抛物阱和三角阱为有源区的激光器和半导体激光放大器可以有较低的透明电流密度。同时价带子带的耦合强烈改变了跃迁矩阵元, 这对量子阱的增益特性会产生影响。

**关键词** 量子阱, 量子限制效应, 有效质量方程

## 1 引言

由于量子阱特有的电子及光电子特性, 采用量子阱结构的光电子及电子器件受到广泛重视, 而且得到了很大发展。迄今为止大多数研究都是针对方势阱, 这是因为方形量子阱容易通过 MBE 或 MOCVD 的源的开关来实现。但是随着 MBE 及 MOCVD 等超薄层材料生长技术的发展和成熟, 使制造高质量的半导体渐变结构成为可能, 可以生长出不同形状的量子阱, 如三角状<sup>[1]</sup>、抛物状<sup>[2]</sup>等。不同形状的量子阱的特性可能有较大的差异, 从而在设计器件时, 我们又多了一个自由度。本文着重从理论上讨论不同形状的量子阱的特性。

## 2 有效质量方程

假设量子阱生长方向平行于[001], 为  $z$  轴。导带被认为是抛物带。对价带, 考虑应变引起的能量变化, 根据文献[3]的结论, 我们采用考虑轻重空穴混合的 Luttinger-Kohn 哈密顿量

$$H = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P + Q + \sigma + \xi & \tilde{R} & 0 & 0 \\ \tilde{R}^- & P - Q + \sigma - \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P - Q + \sigma - \xi & \tilde{R} \\ 0 & 0 & \tilde{R}^- & P + Q + \sigma + \xi \end{bmatrix} \quad (1)$$

其中  $P, Q$  和  $\tilde{R}^\pm$  表示如下

\* 集成光电子学国家重点联合实验室吉林大学实验区开放课题资助项目。

$$P \pm Q = E_{v0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 \pm \gamma_2)k_{//}^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2] \quad (2)$$

$$\tilde{R}^{\pm} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{\sqrt{3}}{2} (\gamma_3 + \gamma_2)k_{//}^2 \pm 2\sqrt{3}\gamma_3 k_{//} k_z \right] \quad (3)$$

其中  $E_{v0}$  为价带带边能量,  $\gamma_1, \gamma_2$  和  $\gamma_3$  为价带有效质量参数。平面内波矢分量  $k_{//}^2 = k_x^2 + k_y^2$ , 平行应变分量  $\epsilon_{xx} = (a - a_0)/a_0$ ,  $a$  和  $a_0$  分别是应变层和衬底的晶格常数。 $\sigma$  和  $\xi$  分别是由静水压应变分量和切应变分量引起的能量移动, 它们由材料组分和生长方向决定。

我们采用差分法求解本征方程, 虽然会带来一些误差, 但其结果对我们理解量子限制效应依然具有指导意义, 而且该方法能很容易地分析任意形状的量子阱。

得到  $E(k)$  曲线后, 利用下面的公式可以得到状态密度(DOS)

$$\text{DOS}(E) = \frac{k_{//}}{\pi L_w} \frac{dk_{//}}{dE} \quad (4)$$

其中  $L_w$  为阱宽。根据求得的本征包络函数可以计算价带和导带之间的跃迁矩阵元, 它与参与跃迁的子带包络函数的空间积分成比例。

### 3 理论计算结果及讨论

以生长于 InP 衬底上的  $\text{In}_{0.89}\text{Ga}_{0.11}\text{As}_{0.24}\text{P}_{0.76}/\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{In}_{0.89}\text{Ga}_{0.11}\text{As}_{0.24}\text{P}_{0.76}$  量子阱为例, 阱区宽度为 10 nm。能量的零点取在 InP 的价带边, 计算中所用的材料参数以及带边位置的公式取自参考文献[3, 4]。

#### 3.1 量子阱形状

我们讨论三种不同形状的量子阱: 方势阱、组分分别为线性及抛物线分布的对称量子阱, 分别称为方阱、三角阱和抛物阱。其量子阱形状见图 1。阱中心组分均为  $x = 0.47, y = 1$ 。在后两种阱的组分渐变区内, 组分  $x$  和  $y$  分别呈线性及抛物线分布。从图 1 可以看见尽管三角阱组分线性变化, 其阱的形状并非线性变化, 只是近似为三角形。这是因为在渐变区晶格常数并不匹配, 而且在不同位置应变大小不同, 从而使带边偏离线性。

#### 3.2 子能带结构及态密度

图 2 示出了三种量子阱中导带的子能带结构。从中可以看到, 方阱的子带最低, 而三角阱

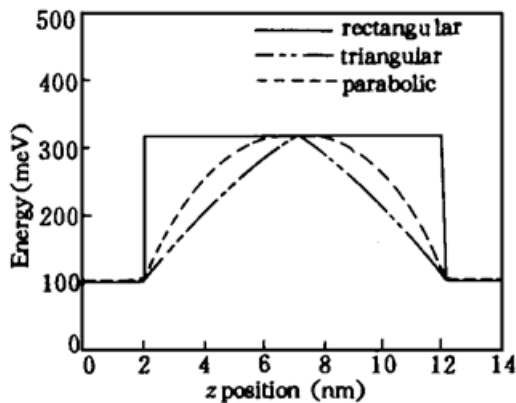


图 1 三种不同量子阱中的价带带边

Fig. 1 The valence band edges of three different quantum wells

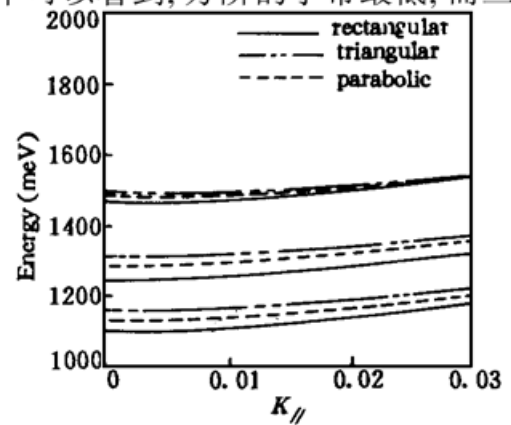


图 2 三种不同量子阱中的导带子带

Fig. 2 Conduction subbands in the three different quantum wells

的最高,说明方阱容纳电子的能力最强,三角阱容纳电子的能力最差,这可以由图 1 看出。如果用方阱来等效三角阱和抛物阱的话,在阱宽相同的条件下,三角阱拥有最小的阱深,也就是说,三角阱限制电子的能力最小。

价带的子带结构示于图 3。与导带相类似,可以看出三角阱对空穴的限制能力最小,但由于轻重空穴的相互作用,价带结构比导带结构复杂得多。由于三角阱和抛物阱的渐变区存在应变,其轻重空穴的能级排列可能与方阱的不一样。在上述情况下,方阱和抛物阱的前三个子能级均为重空穴,而三角阱的第一价带子带为重空穴带,第二则为轻空穴带。

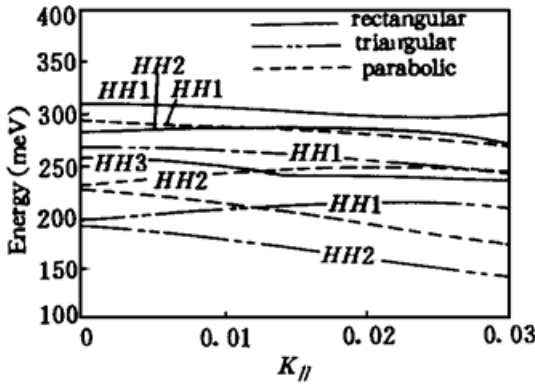


图 3 三种不同量子阱中的价带子带

Fig. 3 Valence subbands of the three different quantum wells

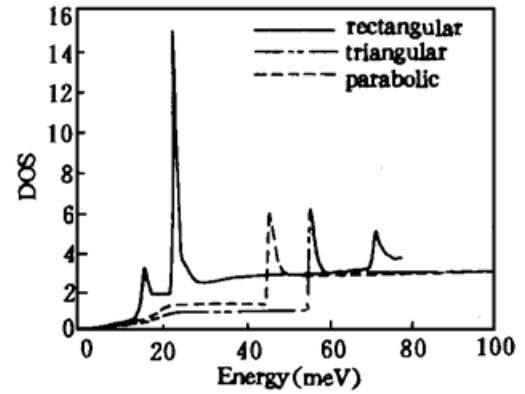


图 4 三种不同量子阱中的空穴态密度

Fig. 4 DOS of hole in the three different quantum wells

图 4 给出了三种不同量子阱中的价带态密度,态密度的计算只考虑了图 3 中的能带,但这已能反应价带带边的情况。图 4 中态密度的单位为  $10^{11} \text{ MeV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ 。从中可以看出,对方阱来讲,限制空穴能力强,第一和第二子带相距比较近,子带的相互作用也增强,导致态密度在接近带边处出现奇异峰值,如我们在文献[5]中所述,其态密度平坦区很小。而对抛物阱及三角阱而言,量子阱限制空穴能力低,使得其第一和第二空穴子带分得很开,价带态密度更接近于阶梯状,对量子阱激光器和激光放大器来讲,这意味着透明载流子浓度的降低。也就是说,采用抛物阱和三角阱作为有源区的激光器和激光放大器的透明电流密度将比方阱的低。但相应地,由于其限制能力不强,容易达到饱和。

### 3.3 跃迁矩阵元

我们还计算了三种量子阱中的跃迁矩阵元,因主要为重空穴带,只将 TE 模结果示于图 5。可以看见,方阱在接近  $k_{\parallel} = 0$  ( $\Gamma$  点) 处,导带第一子带  $e_1$  与价带第一子带  $h_1$  的跃迁矩阵元相对比较大,但随着  $k_{\parallel}$  的增加减小很快,而抛物阱和三角阱的跃迁矩阵元则变化平缓得多。由于方阱和抛物阱的第二价带子带  $h_2$  为第二重空穴,由跃迁选择定则,  $k_{\parallel} = 0$  处  $e_1 - h_2$  的跃迁矩阵元为零;而三角阱的第二价带子带为第一轻空穴带,所以  $\Gamma$  点附近跃迁较强。从图 5 可以看出,价带子带之间的

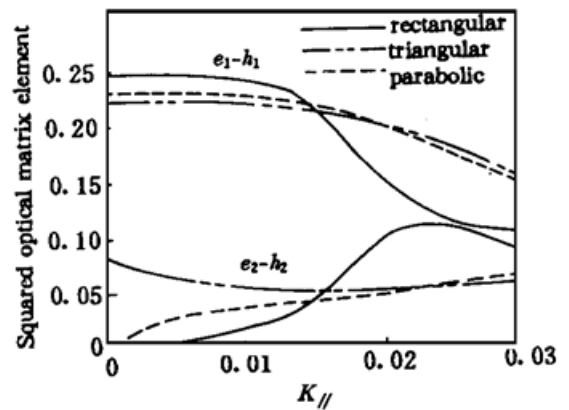


图 5 三种不同量子阱中光学矩阵元平方

Fig. 5 The squared optical matrix elements in the three different quantum wells

耦合和相互作用会强烈地改变  $\Gamma$  点附近的跃迁矩阵元, 这也会对量子阱的增益特性产生影响。

## 4 结 论

通过比较不同形状的量子阱的能带结构、价带态密度、跃迁矩阵元可以看出, 在阱宽相同的条件下, 方阱有最大的限制能力, 但其价带子带耦合强烈导致态密度很大; 而抛物阱和三角阱有更平坦态的密度曲线, 使得以抛物阱和三角阱为有源区的激光器和激光放大器可以有较低的透明电流密度。同时价带子带的耦合强烈改变了跃迁矩阵元, 这对量子阱的增益特性会产生影响。

### 参 考 文 献

- 1 K.-K. Law, R. H. Yan, A. C. Gossard *et al.*. Electronic-field-induced absorption changes in triangular quantum wells grown by pulsed-beam molecular-beam-epitaxy technique. *J. Appl. Phys.*, 1990, **67**(10) : 6461~ 6465
- 2 T. Ishikawa, S. Nishimura, K. Tada. Quantum-confined stark effect in a parabolic potential quantum well. *Japan J. Appl. Phys.*, 1990, **29**(8) : 1466~ 1473
- 3 S. L. Chuang. Efficient band-structure calculations of strained quantum wells. *Phys. Rev.*, 1991, **43**(12) : 9649~ 9661
- 4 T. Ishikawa, J. E. Bowers. Band lineup and in-plane effective mass of InGaAsP or InGaAlAs on InP strained-layer quantum well. *IEEE J. Quant. Electr.*, 1994, **QE-30**(2) : 562~ 569
- 5 张哲民, 陈维友, 刘式墉 等. Effective-masses of hole in strained quantum wells. 海峡两岸及香港地区第三届中华光电子学术研讨会, 长春, 1996, 215~ 218

## Quantum Confinement Effect in Different-shaped Quantum Wells

Zhang Zhemin<sup>1</sup> Chen Weiyou<sup>2</sup> Liu Shiyong<sup>2</sup> Huang Dexiu<sup>1</sup>

(<sup>1</sup>Department of Electronic Engineering, Huazhong University of Science & Technology, Wuhan 430074

<sup>2</sup>The National Key Laboratory of Integrated Optoelectronics, Jilin University, Changchun 130023)

**Abstract** By solving the effective-mass equations using the difference method, taking into account the strain effects and valence-band mixing-effect, we have compared the band structures, DOS's of valence band and the optical matrix elements for different-shaped wells. With the same well width, rectangular well has the strongest confinement on carriers, but parabolic and triangular wells have flatter DOS curves, which are more analogous to step-like DOS. Thus laser diode and semiconductor laser amplifier with these two kinds of wells as active layers may have lower transparent current densities. The mixing between valence subbands has greatly changed the optical matrix element, so it will have influence on the gain characteristics of quantum wells.

**Key words** quantum well, quantum confinement effect, effective-mass equations