

I 类超晶格势阱中能级分布及电子跃迁规律研究

刘晓燕¹ 吕惠民²

(1 西安文理学院物理系, 西安 710065)

(2 西安理工大学, 西安 710048)

摘要 在研究大量实验曲线的基础上, 指出势阱所有能级均有一定的宽度, 电子或空穴在各能级中出现的概率符合正态分布, 从理论上分析了 I 类超晶格和双势垒单势阱的发光光谱与吸收光谱. 解释了 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 多量子阱和超晶格吸收光谱吸收边及量子阱变窄时各吸收峰的“蓝移现象”及 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 双势垒单量子阱样品的电流—电压特性曲线及电导—电压特性曲线的特征和出现的“负阻效应”.

关键词 超晶格; 单势阱; 吸收光谱; 蓝移; 隧道效应

中图分类号 O437 **文献标识码** A

0 引言

自超晶格概念提出, 并于 1970 年首次在砷化镓半导体上制成超晶格以来^[1], 由于分子束外延 (MBE) 技术的发展, 能够生长出界面非常完整的半导体异质结, 其中一种是 Ga_{1-x}Al_xAs 与 GaAs 组成的异质结. 这不但提供了能够进行实验观察量子效应的物理模型^[2,3], 同时在技术应用上具有很大潜力^[4,5]. 目前, 对超晶格材料及其性质的实验研究十分活跃^[6~8]. 本文从理论上提出了电子在能带上能量分布的正态规律, 研究了半导体超晶格 Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs 多量子阱和超晶格吸收光谱吸收边及量子阱变窄时各吸收峰的“蓝移现象”及 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 双势垒单量子阱样品的电流—电压特性曲线及电导—电压特性曲线的特征和出现的“负阻效应”.

1 超晶格的能级状态

半导体超晶格结构一般是由两种不同禁带和电子亲和力的半导体材料周期性交替生长. 从能带结构来看, 这种多层结构的能带由势垒层和势阱层交替组成, 形成多量子阱, 如图 1.

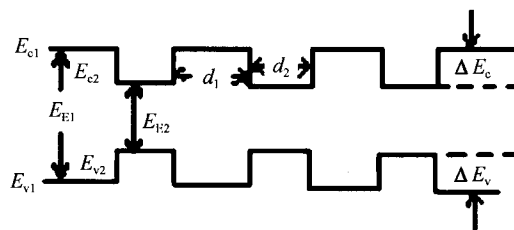


图 1 超晶格多量子阱能带结构

Fig. 1 Schematic diagram of energy band in multi-quantum well

如果势垒足够厚, 各个势阱之间的耦合可以忽略不计, 电子(或空穴)在 Z 方向的运动被限制在势阱中, 根据量子力学, 电子在无限深势阱中(或空穴在势垒中)的能量状态可以表示为

$$E_z = \frac{\eta^2}{2m_c} \left(\frac{\pi}{d_z} \right)^2 n^2 \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (1)$$

式中 d_z 为势阱层厚度, n 是整数. 可见, 电子(或空穴)在 Z 方向的能量是量子化的, 形成定域能级, 而在平行方向(XY 平面内)电子(或空穴)的运动仍是自由的, 为连续能谱, 形成二维电子气. 在有效质量近似(EMA)下, X 或 Y 方向的能量可以表示为

$$E_x = \frac{\eta^2}{2m_c} K_x^2 \quad (2)$$

此理论可以解释超晶格中出现的一些现象, 如多量子阱的吸收谱中吸收边的蓝移现象.

2 问题的提出

1) 将电子在无限深势阱中(或空穴在势垒中)的能量状态表达式(1)与原子物理中氢原子发光的波尔理论的能量公式

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad (n=1, 2, 3) \quad (3)$$

相比较, 不难知道, 电子在无限深势阱中(或空穴在势垒中)的能量状态表达式也是一个半经典半量子的理论公式, 因而, 存在一定的理论缺陷.

2) 式(1)成立的前提是: ①无限深势阱中的电子(或无限高势垒中的空穴); ②或双异质结间的单量子阱中的电子; ③或势垒厚度远大于波函数穿透深度的多量子阱结构, 即相邻势阱间波函数的交叠(或者说相互作用)可以忽略.

图 2 是丁格尔等人于 20 世纪 70 年代观察到的分子束外延(MBE)生长的 GaAs/Ga_{0.8}Al_{0.2}As 多量子阱的吸收光谱的实验结果, 其势垒层禁带宽度为 E_g ,

大约等于 1.75 eV. 图 2 中的多量子阱在超晶格周期由 400 nm 减小到 14 nm 时, 相邻势阱间的波函数的交叠(或者说相互作用)已经不能忽略, 即势阱能级 E_n 已经展宽为能量子带. 这种情况下, 系统的物理性质被明显调制了, 明显的异于孤立势阱或相互独立的多势阱情况, 并且与超晶格周期的大小有关, 尤其是和势阱层的厚度及厚度的均匀性有密切的关系.

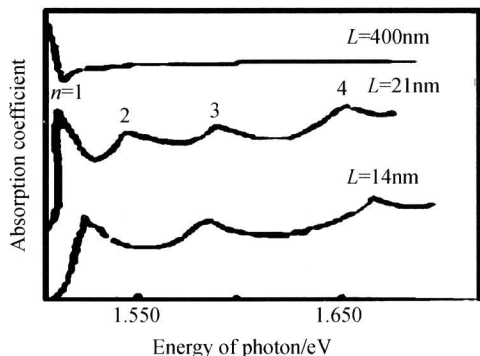


图 2 多量子阱地吸收光谱
Fig. 2 Absorption spectrum of multi-quantum well

综上所述, 用电子在无限深势阱中(或空穴在势垒中)的能量状态这个半经典半理论公式解释多量子势阱中的“蓝移”现象有点勉强. 对于双势垒单量子阱共振隧穿效应中的“负阻效应”的解释也同样显示出完美性.

3 势阱中电子能级及跃迁规律的假设

根据量子力学原理, 电子在势阱中的运动状态、能级和跃迁必须满足以下几个条件:

1) 电子以波函数形式在势阱中运动, 其波长必须满足

$$d_2 = n \frac{\lambda}{2} \quad (n = 1, 2, 3 \dots)$$

式中 d_2 为势阱宽度.

2) 势阱中电子的能量满足

$$E_z = \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \left(\frac{\pi}{d_2} \right)^2 n^2 \quad (n = 1, 2, 3 \dots)$$

且 $E_z \leq |\Delta E_c|$, ΔE_c 为势阱深度;

3) 各能级均有一定宽度, 电子在各能级子带中出现的概率符合正态分布, 以满足条件 2) 处为最大;

4) 电子或空穴在量子阱中能级间的跃迁应当遵守 $\Delta n = 0$ 的选择定则;

5) 在研究量子阱或超晶格时, 不可忽略量子理论中的“隧道效应”的贡献.

4 用假设对现有试验结果的解释

4.1 对多量子阱吸收谱“蓝移现象”的解释

由图 2 可以看出, 当势阱宽度为 400 nm 时, 由于势阱宽度比较大, 电子在势阱中的运动十分接近

GaAs 体材料中的运动, 自然量子化假设中的①②条件并不严格满足, 因而, 吸收曲线当然接近典型的高纯 GaAs 体材料的地吸收曲线. 但该电子必定处在量子势阱中, 受量子尺寸效应的限制, 是准二维的. 因此, 势阱宽度为 400 nm 的 GaAs/Ga_{0.8}Al_{0.2}As 多量子阱的吸收曲线在吸收边出现了一个尖锐地吸收峰. 图 3 给出了势阱宽度为 400 nm 时的吸收曲线和体材料的吸收曲线.

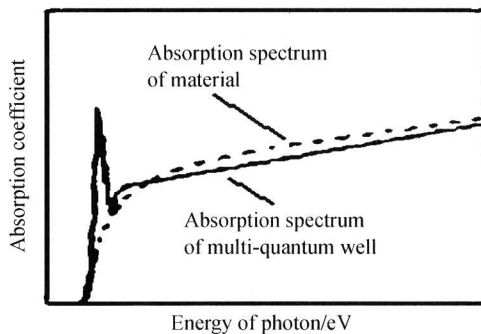


图 3 体材料与量子阱吸收谱比较
Fig. 3 Comparison between sample and absorption spectrum

随着势阱宽度的减小, 量子化程度愈来愈高, 宽度分别为 21 nm 和 14 nm 所对应的两条吸收谱线明显地显出量子化特征(图 2). 当势阱宽度较小时, 根据假设②, 电子在势阱中运动的能量变大, 由于能量和振幅平方成正比(振幅决定电子运动的范围), 因而, 能带也相应展宽. 也就是说, 宽度为 14 nm 势阱中的电子某一能级相对宽度为 21 nm 势阱中的电子同一能级的能量高、能带宽. 则势阱宽度较小者相对于势阱较大者所对应的吸收谱线要发生蓝移, 且每条谱线的半高宽增加, 因为施主能级和受主能级均展宽了. 比较图 2 中的两条谱线就可以说明这一点.

图 4 是两个不同宽度量子阱能带分布与电子跃迁规律比较. 为了便于理解, 暂不考虑价代量子阱中轻重空穴束缚态能级的差异. 根据假设 $E_{v,i} < E'_{c,i}$, 即最可几跃迁 $2' \rightarrow 2$ 发出的光线频率高, 故势阱宽度比较小, 对应的吸收谱线的峰值发生蓝移, 蓝移的量值为 $\Delta\gamma = (E'_{c,i} - E_{v,i})/h$; 由于导带中某一能带顶和能带底分别跃迁到价带对应能级的两条谱

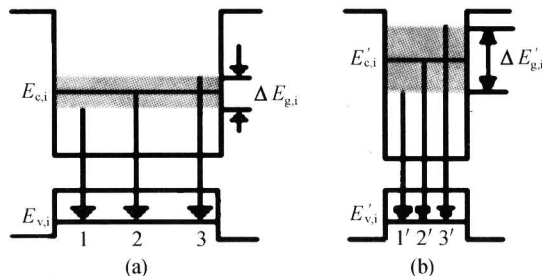


图 4 不同宽度量子阱能带分布与电子跃迁规律比较
Fig. 4 Comparison between energy band distribution and electron transition in quantum well with different width

线的能级差标志着发光谱线底部的宽度,因为势阱宽度变窄,所以 $\Delta E_{g,i} < \Delta E'_{g,i}$,即图 4(a) 1、3 跃迁的能级差比图 4(b) 中 1'、3' 跃迁的能级差小,故势阱宽度变窄,相应谱线的宽度变宽。

4.2 对共振隧道效应中“负阻效应”的解释

共振隧穿效应最早是张立刚^[9]等人在 77 K 温度下,在 $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ 双势垒单势阱结构中观察到的。图 5 给出了双势垒单量子阱样品的电流-电压特性和电导-电压特性。图 6 第一个小图表示未加电压时双势垒单量子阱的能带图,两端 n^+ -GaAs 是高掺杂的,其费米能级 E_F 高于导带底,量子阱中两能级表示 E_1 和 E_2 束缚态能级。

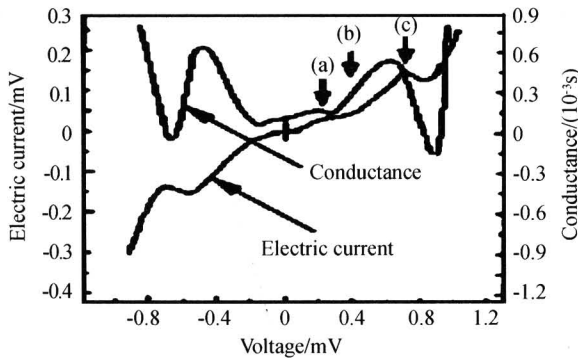


图 5 双势垒单量子的电流-电压和电导-电压特性
Fig. 5 Electric current-voltage and conductance-voltage characteristic of single quantum well sample

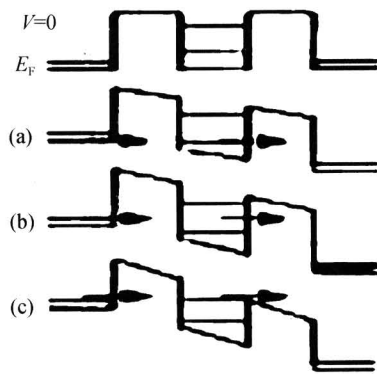


图 6 双势垒单量子阱共振隧穿效应
Fig. 6 Resonance tunneling effect of single quantum well with double barrier

根据假设③,量子阱中的每一级能级均有一定的宽度,且电子出现在各个能级中部(即由假设②的决定的位置)的概率是最大的,能级上下缘电子出现的概率趋于零,如图 7(a)、(b)。当右端加正向电压时,能级左方相对右方升高,发生倾斜。随着电压 V 的增加,势阱中 E_1 能级相对左方降低,当 E_1 降低到该能级下缘等于 n^+ -GaAs 发射极费米能级 E_F 时,发射极区导带中能量较高的电子与势阱内 E_1 子带能量较低电子开始发生共振,即隧穿共振开始发生,电流变化率开始增大,图 7(c) 中的 a 点(图中的虚线代表 GaAs 体材料的电流-电压特性);外

加电压继续增大,参与隧穿共振的电子数越来越多,电流急剧增加,图 7 中的 $a-b$ 段曲线;当发射极区导带中最可几能级等于势阱中满足假设②的 $E_{c,1}$ 时,发射极区导带中所有 x 方向能量等于 E_1 的电子均可与阱内 E_1 子带中具有相同 $k_{//} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 的态发生共振,有较大的概率随穿通过势垒,使电流达到最大值,图 7 中的 b 点,即发生了第一次完全共振隧穿;外加电压继续升高,发射极区导带中最可几能级开始高于势阱中满足假设②的 $E_{c,1}$,参与隧穿共振的电子数目减少,电流开始下降,图 7 中的 $b-c$ 段曲线;当发射极区导带中能带底等于势阱内 E_1 子带中的最低能级(E_1 能带的下缘)时,由图 7(b) 可知,参与隧穿共振的电子概率将为零,因此,电流达到极小值,图 7 中的 c 点,标志着第一次隧穿共振效应结束。此后,电流-电压特性又进入类似体材料特征。同理,当外加电压升高至一定值时,使左方 E_F 能级的上缘与 E_2 能级的下缘对齐时,第二次共振隧穿开始发生,电流变化率又一次变大,直至左方 E_F 能级与 E_2 能级对齐时,第二次共振隧穿达到极点,电流达到第二次极大值;外加电压继续升高,左方 E_F 能级高于 E_2 能级,共振隧穿效应开始减弱,电流随之下降,直至达到第二次极小值,第二次隧穿共振效应结束……。图 5 中电流-电压曲线上(a)(b)处出现的极大值分别对应于第一次和第二次共振隧穿,且(b)处附近发生明显的负微分电阻区,该处出现负阻效应就是自然而然的了。实际上,第一次共振隧穿区附近也有负阻效应发生,不过在图 5 电流-电压曲线上反映的不太明显而已。

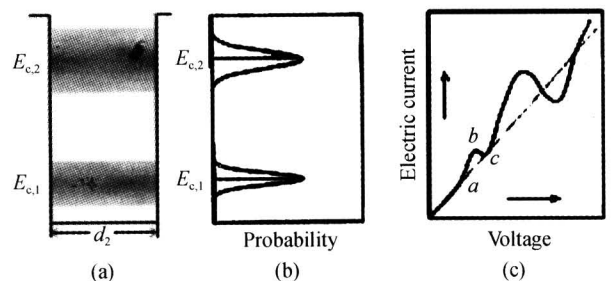


图 7 共振隧穿效应中的负阻效应
Fig. 7 Schematic diagram of negative resistance effect in resonance

那么,第二次共振隧穿效应时发生的“负阻效应”为什么比较明显?主要原因是:在发生第一次共振隧穿效应的同时,量子理论中的“隧道效应”也随之发生。随着外加电压继续升高,左方 E_F 能级与 E_1 能级的差值愈来愈大,“隧道效应”愈加明显。第一次隧穿共振效应结束之后,第二次共振隧穿开始发生之前,电流-电压曲线中电流的变化率之所以比体材料大,就是因为随着外加电压的升高“隧道效

应”愈来愈明显的缘故. 当第二次共振隧穿效应发生时, E_1 能级上的电子并不发生共振隧穿效应, 但此时“隧道效应”很明显, 因此, 第二次共振隧穿效应时发生的“负阻效应”比第一次共振隧穿效应时发生的“负阻效应”要明显得多.

5 结论

由于超晶格的阱宽、垒厚以及组分都可以调节, 也就是势阱中能级的高低可以调节, 因此发光波长在相当大的范围内可以调节. 作为全色显示, 目前急需解决蓝色发光问题, 利用多层膜和超晶格能带结构的原理, 可以对发光器件进行分层优化设计, 以便提高发光效率和调节发光波长^[10-12]. 这为蓝光发射提供了一种优化设计方案. 本文总结出的双势垒单势阱和超晶格发光(吸收)结论对研究以 GaN 为基材料的化合物的发光特性研究具有一定的指导意义.

参考文献

- Esaki L. In highlights in Condense Matter Physics and Future Prospects. Plenum, New York, 1991. 83~89
- Ahn D, Chuang S L. Intersubband optical absorption in a semiconductor quantum well. *J Appl Phys*, 1987, **62**(7): 3052~3055
- Pan S H, Feng S M. Optical saturation of intersubband absorption in semiconductor super lattices. *Phys Rev B*, 1991, **44**(10): 8165~8169
- Zhao Hui, Wang Yongsheng, Xu Zhang, *et al.* Intervalley distribution of electrons in thin film electroluminescent devices. *Chinese Journal of Semiconductors*, 1999, **20**(8): 702~705
- Liu H C. Quantum well infrared photodetectors: the basic design and new research directions. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2001, **22**(5): 529~537
- 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): 595~603
Tian Y, Peng Y H, Chen W Y, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 1997, **26**(7): 595~603
- Tan Peng, Bi 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
- 李文兵, 赵国忠, 王福合, 等. 半导体超晶格子带间跃迁光吸收理论研究. *光子学报*, 2006, **35**(1): 61~64
Li W B, Zhao G Z, Wang F H, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(1): 61~64
- 沈学础著. 半导体光谱和光学性质. 北京: 科学出版社, 2002. 138
Shen X C. Spectrum and Optics Quality of Semiconductor. Beijing: Science Press 2002. 138
- Liu Dandong, Chen Guangde, Xu Zhongfeng, *et al.* A switching mechanism based on photonic Quantum-well effects. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(9): 1321~1324
- Lu Zhi'en, Guo Kangxian, *et al.* Change of total refractive index in finite V-shaped quantum well. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(7): 1001~1004
- 刘翠红. 柱形量子点中的三阶极化率. *光子学报*, 2005, **34**(11): 1770~1744
Liu C H. *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(11): 1770~1744

Study of the Energy Levels Distributions in Super Lattice I in Potential well and the Regulation of the Electronics Jump

Liu Xiaoyan¹, Lü Huimin²

¹ Dept. of physics, Xi'an University of Art and Science, Xi'an 710065

² Xi'an University of Technology, Xi'an 710048

Received date: 2006-03-16

Abstract Based on the study of a great deal of the experiment curves, the current study points out that all the energy levels in potential well have a certain width and the probability of the appearance of the electronics or holes in each energy level matches the normal distribution, and analyses the luminescent spectrum and absorption spectrum of Superlattice I and single potential well with double barrier theoretically, explains the absorption sides of the absorption spectrum in both the GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs multi-quantum wells and Superlattice and the “blue move” of each absorption peaks when the quantum well narrowing down. Furthermore, discusses the electric current-voltage and the conductance-voltage characteristic of the GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs single potential well sample with double barrier and the “negative resistance effect”.

Keywords Superlattice; Single potential well; Absorption spectrum; Blue move; Tunneling effect



Liu Xiaoyan was bore in 1964. She graduated from the Colloge of Physics and Information Technology of Shaanxi Normal University in 1986, and received her master's degree in 2000. She has been working at the teaching and the research of the quantum mechanics since 2001.