

# GaAs/AlGaAs 超晶格微带带宽的计算\*

贺利军<sup>1,†</sup> 程兴奎<sup>1</sup> 李 华<sup>1</sup> 张 健<sup>1</sup> 周均铭<sup>2</sup> 黄 绮<sup>2</sup>

(1 山东大学物理与微电子学院, 济南 250100)

(2 中国科学院物理研究所, 北京 100080)

摘要: 利用 MBE 设备制备 GaAs/AlGaAs 超晶格材料, 在低温 ( $T = 77\text{ K}$ ) 下测量样品的光电流谱, 从电子波动的观点出发, 通过考虑电子波在超晶格阱层/势垒层的反射和干涉, 讨论了超晶格的电子态. 提出了一种计算超晶格微带带宽的方法, 并计算了 GaAs/AlGaAs 超晶格的微带带宽. 理论计算结果和实验结果符合得相当好.

关键词: 超晶格; 电子态; 微带带宽; 计算法

PACC: 7240; 7865

中图分类号: O471.5 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2006)01-0059-04

## 1 引言

近二十多年来, 半导体超晶格和微结构的研究已取得很大进展, 并在如发光显示技术、光互联放大技术及探测技术<sup>[1,2]</sup> 等许多方面获得重要应用. 关于超晶格电子态的计算已有很多报道<sup>[3~7]</sup>, 而对于超晶格微带带宽的计算一般都采用 Kronig-Penney 模型. 本文从电子波动的观点出发, 考虑电子在超晶格界面的反射与干涉, 提出了一种计算超晶格微带带宽的新方法, 并计算了 GaAs/AlGaAs 超晶格的微带带宽, 然后将理论计算结果与实验结果作了比较.

## 2 样品的制备及测量结果

在半绝缘的 GaAs 衬底上, 用 MBE 设备首先生长掺 Si 的 GaAs 底层, Si 的掺杂浓度为  $2 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ , 层厚为  $1\mu\text{m}$ , 然后生长 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 超晶格结构, GaAs 阱层厚为  $4.8\text{ nm}$ , Si 的掺杂浓度为  $1 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ , Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 势垒层厚  $10\text{ nm}$ , 共 50 个周期, 最后生长掺 Si 的 GaAs 顶层, Si 的掺杂浓度为  $2 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ , 层厚  $0.5\mu\text{m}$ . 样品被腐蚀成  $200\mu\text{m} \times 220\mu\text{m}$  的台面, 然后在底层和顶层 GaAs 蒸发 AuGeNi 合金, 光刻出上下电极, 形成欧姆接触, 并引线、装入杜瓦瓶, 在温度  $T = 77\text{ K}$  下测量了样品的光电流. 测量结果如图 1 所示. 可以看出, 光电流谱中存在多个电流峰, 其中最强的电流峰位于  $\nu = 1589\text{ cm}^{-1}$  处, 在  $1779, 2129$  及  $2401\text{ cm}^{-1}$  附近是弱峰.

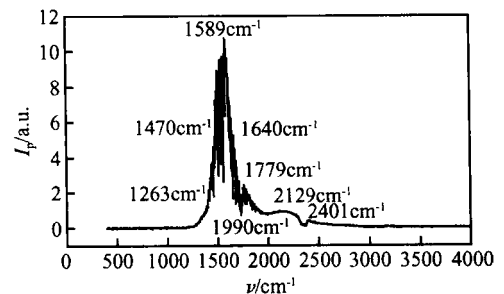


图 1 对 GaAs/AlGaAs 超晶格, 在  $T = 77\text{ K}$  下测量出的光电流谱

Fig. 1 Measured photocurrent spectrum at  $T = 77\text{ K}$  for GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As superlattice

## 3 分析与讨论

设  $z$  方向与超晶格界面垂直, GaAs/AlGaAs 超晶格的势分布如图 2 所示,  $L_w$  和  $L_b$  分别是量子阱宽和垒宽.  $U_0$  是势垒高度. 令 GaAs 导带底电子势能为零, 在有效质量近似的框架下, 通过解  $z$  方向的薛定谔方程, 可得对  $E > U_0$ , 解为  $\psi_w(z) = Ae^{iK_w \cdot z} + A e^{-iK_w \cdot z}$ ,  $\psi_b(z) = Be^{iK_b \cdot z} + B e^{-iK_b \cdot z}$ . 其中  $K_w = \sqrt{\frac{2m_w^* E}{\hbar^2}}$ ,  $K_b = \sqrt{\frac{2m_b^* (E - U_0)}{\hbar^2}}$ , 分别为电子在阱层和势垒层中的波矢.  $\psi_w(z)$ ,  $\psi_b(z)$  分别为在阱层和势垒层传播的平面电子波, 第一项表示电子波向  $z$  方向传播, 第二项表示电子波向  $-z$  方向传播.  $\lambda_w$ ,  $\lambda_b$  分别为电子在阱层和势垒层中的波长, 令  $\lambda_w = \frac{2\pi}{K_w}$ ,  $\lambda_b = \frac{2\pi}{K_b}$ , 则

\*国家自然科学基金资助项目(批准号:69976016)

†通信作者. Email: helijun4@126.com

2005-07-15 收到, 2005-09-23 定稿

$$w = \frac{h}{\sqrt{2m_w^* E}}, \quad b = \frac{h}{\sqrt{2m_b^* (E - U_0)}} \quad (1)$$

显然可以看出  $w < b$ , 即在势垒区的电子波长大于在阱区的电子波长. 当电子波沿  $z$  方向在超晶格中由界面  $A_1, A_2, A_3, \dots$  传播到  $B_1, B_2, B_3, \dots$  时, 电子波一部分透射过此界面, 另一部分被反射, 被反射的电子波到达界面  $A_1 (A_2, A_3, \dots)$  后再返回到界面  $B_1 (B_2, B_3, \dots)$ , 这两部分电子波的相位差为

$$= 2 \frac{2L_b}{b} \quad (2)$$

据波动理论, 当透射波和反射波的相位差为  $2n\pi$  的偶数倍时, 即

$$= 2 \frac{2L_b}{b} = 2n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

两部分电子波发生相长干涉, 这表明, 电子波对势垒的透过率达到最大值. 由 (1), (3) 式可得, 这时势垒区电子的能量为

$$E = U_0 + \frac{\hbar^2 K_b^2}{2m_b^*} = U_0 + \frac{\hbar^2}{2m_b^*} \left(\frac{n}{L_b}\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

其中  $m_b^* = (0.067 + 0.083x)m_0$ <sup>[8]</sup>;  $m_0$  是电子的质量, 取  $x = 0.3$ ,  $L_b = 10\text{nm}$ , 代入 (4) 式得

$$E_{2n} = U_0 + 0.0408n^2 (\text{eV}), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

即能量为  $E_{2n}$  的电子对势垒的透过率最大, 此能态的电子可沿  $z$  方向在超晶格中运动, 在势垒以上形成微带.

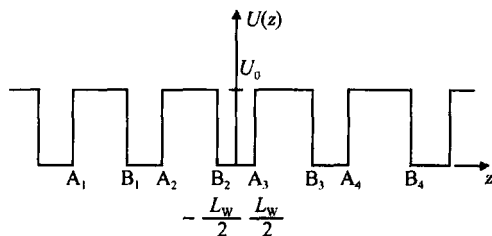


图 2 GaAs/AlGaAs 超晶格的势分布

Fig. 2 Potential distribution for GaAs/AlGaAs superlattice

当透射波和反射波的相对相位差为  $\frac{\pi}{4} + 2n\pi$  时, 它们干涉波的强度为原来的 3.414 倍, 能穿透势垒. 因此我们认为这时的电子波对势垒仍然是透过的, 即相对相位差小于  $\frac{\pi}{4} + 2n\pi$  的电子波, 它们的干涉波对势垒是透过的. 这时

$$= 2 \frac{2L_b}{b} = 2n\pi \pm \frac{\pi}{4}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6)$$

用同上的计算方法由 (6) 式可得

$$E_{2n - \frac{1}{4}} = U_0 + 0.0408 \left(n - \frac{1}{8}\right)^2 (\text{eV}),$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

$$E_{2n + \frac{1}{4}} = U_0 + 0.0408 \left(n + \frac{1}{8}\right)^2 (\text{eV}),$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (8)$$

当相位相差  $2n\pi$  时, 他们发生相消干涉, 即电子波对势垒的透过率最小. 这时

$$= 2 \frac{2L_b}{b} = 2n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

用同上的计算方法由 (9) 式可得

$$E_{2n} = U_0 + 0.0408 \left(n - \frac{1}{2}\right)^2 (\text{eV}),$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (10)$$

$$E_{2n} = U_0 + 0.0408 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 (\text{eV}),$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (11)$$

对 GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 超晶格,  $E_g = 1.247x$ , 当  $x = 0.3$  时,  $E_c = U_0 = 0.65$  eV,  $E_g = 0.243\text{eV}$ <sup>[9]</sup>, 当  $n$  取 1, 2, 3 时, 由 (5), (7), (8), (10), (11) 式算出的  $E$  的值列于表 1.

表 1 GaAs/AlGaAs 超晶格微带位置的理论计算值

Table 1 Calculated micro-band positions for GaAs/AlGaAs superlattice

$n$	$E_{2n - \frac{1}{4}}$	$E_{2n - \frac{1}{4}}$	$E_{2n}$	$E_{2n + \frac{1}{4}}$	$E_{2n + \frac{1}{4}}$
1	0.253	0.274	0.284	0.295	0.335
2	0.335	0.386	0.406	0.427	0.498
3	0.498	0.580	0.610	0.641	0.743

发生相长干涉的电子波, 能够透过势垒, 处于其能态上的电子可沿  $z$  方向在超晶格中运动, 在势垒以上形成微带. 微带不是单一的电子能态, 而是具有一定能量范围的能带, 微带的中心能量对应于电子干涉的最大值, 即  $E_{2n}$ . 我们取微带的边界为两电子波相位差为  $2n\pi \pm \frac{\pi}{4}$  时对应的能量, 即取  $E_{2n - \frac{1}{4}}$ ,

$E_{2n + \frac{1}{4}}$  为微带两侧的边界, 则微带的宽度  $E_n$  为

$$E_n = E_{2n + \frac{1}{4}} - E_{2n - \frac{1}{4}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12)$$

由 (12) 式可算出, 当  $n$  取 1, 2, 3 时对应的微带带宽为  $E_1 = 21\text{meV}$ ,  $E_2 = 41\text{meV}$ ,  $E_3 = 61\text{meV}$ . 图 3 为超晶格 3 个微带的位置及带宽的示意图.

量子阱中的基态电子能级可由下式计算<sup>[10]</sup>:

$$E_{C0} = \frac{\left(\frac{\pi}{2} \times \frac{a_c}{l_w + l_w}\right)^2}{\left[1 + \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 b_c \left(\frac{l_w}{l_w + l_w}\right)^3\right]} \quad (13)$$

其中  $a_c = \frac{2\hbar}{\sqrt{2m_{cw}^*}}$ ,  $b_c = \frac{m_{cw}^*}{m_{cb}^*}$ ,  $l_w = \frac{a_c}{\sqrt{b_c} E_c}$ ,  $m_{cw}^*$  和  $m_{cb}^*$  分别为阱中和垒中电子的有效质量. 对于 GaAs/AlGaAs 结构,  $m_{cw}^* = 0.067m_0$ ,  $m_{cb}^* = (0.067 + 0.083x)m_0$ ,  $E_c = 0.65$  eV,  $E_g = 1.247x$ . 若  $x = 0.3$ ,  $L_w = 4.8\text{nm}$ , 则将有关数值代入计算得到:  $E_{C0} = 69.0\text{meV}$ .

量子阱中电子的 Fermi 能级  $E_F = \frac{\hbar^2 K_F^2}{2m_w^*}$ , 其中  $K_F = \sqrt{2}$ ;  $n = n_0 L_w$ , 是电子薄层密度;  $n_0$  为体电子密度, 在本实验中, 取  $n_0 = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ;  $L_w = 4.8 \text{ nm}$ , 代入计算可得  $E_F = 17 \text{ meV}$ ;  $E_{CO}$  为电子基态能级, 则  $E_F$  在  $E_{CO}$  以上  $17 \text{ meV}$  处。

当存在光激发时, 低能态电子可向高能态跃迁, 光跃迁如图 3 所示. 电子从费米能级跃至第一微带, 理论上跃迁能为  $E_p = E_2 - E_F = 0.284 - 0.086 = 0.198 \text{ eV}$ , 实验测得的光电流峰的位置为  $1589 \text{ cm}^{-1}$ , 对应的能量为  $0.197 \text{ eV}$ , 因此此光电流峰为电子从费米能级到第一微带的跃迁. 从实验测得的光电流谱可以算出, 此峰的半高宽为  $(1640 - 1470) \times 1.24 = 0.021 \text{ eV}$ , 正好与我们前面算出的第一微带的带宽  $E_1 = 0.021 \text{ eV}$  相符合. 这与 Kronig-Penney 模型计算出来的  $0.022 \text{ eV}$  很好地吻合. 在光电流谱中, 强光电流峰左右两侧两个光电流最低值的位置为  $1263$  和  $1980 \text{ cm}^{-1}$ , 分别对应着超晶格第一微带中  $E_{2-}$  和  $E_{2+}$  的位置. 左侧最低位置为  $1263 \text{ cm}^{-1}$ , 即跃迁能为  $0.157 \text{ eV}$ , 对应着从  $E_F$  到  $E_{2-}$  的能量  $0.167 \text{ eV}$ ; 右侧最低位置为  $1980 \text{ cm}^{-1}$ , 即跃迁能为  $0.246 \text{ eV}$ , 对应着从  $E_F$  到  $E_{2+}$  的能量  $0.249 \text{ eV}$ , 两者基本吻合.

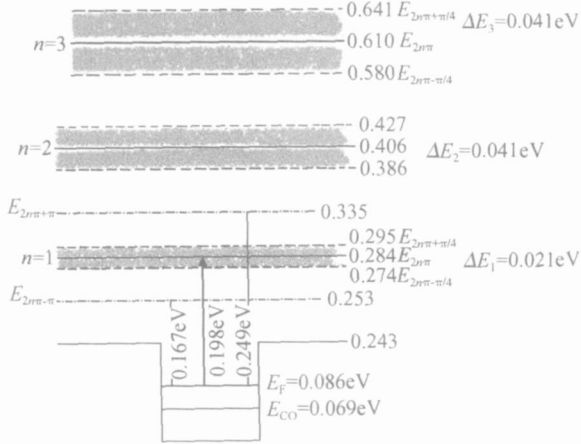


图 3 超晶格微带结构及在  $E_F$  能级上电子的光跃迁示意图  
 Fig.3 Diagram of microband structure of superlattice and optical transition of electron on Fermi level  $E_F$

### 4 结论

电子波在超晶格的界面发生反射和干涉, 其相长干涉形成相应的电子态, 即超晶格的微带. 我们由此观点出发计算了超晶格的电子态, 给出了一些离散能级及形成的微带. 计算了电子在离散能级间光跃迁时形成的光电流峰的位置以及峰的半高宽, 并与实验结果进行比较. 实验测量的结果与计算结果符合得相当好, 说明这种计算微带带宽的方法是有效的.

### 参考文献

- [ 1 ] Zhao Hui, Wang Yongsheng, Xu Zheng, et al. Intervalley distribution of electrons in thin film electroluminescent devices. Chinese Journal of Semiconductors, 1999, 20(8) :702 (in Chinese) [赵辉, 王永生, 徐征, 等. 薄膜电致发光器件中电子的谷间分布. 半导体学报, 1999, 20(8) :702]
- [ 2 ] Liu H C. Quantum well infrared photodetectors: the basic design and new research directions. Chinese Journal of Semiconductors, 2001, 22(5) :529
- [ 3 ] Mukherji D, Nag B R. Band structure of semiconductor superlattice. Phys Rev B, 1975, 12(10) :4338
- [ 4 ] Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. Phys Rev B, 1981, 24(10) :5693
- [ 5 ] Ninno D, Wong K B, Gell M A, et al. Optical transitions at confined resonances in (001) GaAs-GaAlAs superlattices. Phys Rev B, 1985, 32(4) :2700
- [ 6 ] Pan Shaohua, Feng Simin. General formalism of Kronig-Penney model suitable for superlattice application. Phys Rev B, 1991, 44(11) :5660
- [ 7 ] Cheng Xingkui, Zhou Junming, Huang Qi. The reflection of electrons at the interface of superlattice. Science in China (Series A), 2002, 45(1) :116
- [ 8 ] Adachi S. GaAs, AlAs, AlGaAs: Material parameters for use in research and device application. J Appl Phys, 1985, 58(3) :R1
- [ 9 ] Levine B F, Bethea C G, Shen V O, et al. Tunable long-wavelength detectors using graded barrier quantum wells grown by electron beam source molecular beam epitaxy. Appl Phys Lett, 1990, 57(4) :383
- [ 10 ] Toshihiko Makino. Analytical formulas for the optical gain of quantum well. IEEE Quantum Electron, 1996, 32(3) :493

## Calculation of Microband Breadth of GaAs/AlGaAs Superlattice\*

He Lijun<sup>1,†</sup>, Cheng Xingkui<sup>1</sup>, Li Hua<sup>1</sup>, Zhang Jian<sup>1</sup>, Zhou Junming<sup>2</sup>, and Huang Qi<sup>2</sup>

(1 *Institute of Physics and Microelectronics, Shandong University, Ji'nan 250100, China*)

(2 *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China*)

**Abstract:** GaAs/AlGaAs superlattices are grown by molecular beam epitaxy (MBE), and their photocurrent are measured at low temperature ( $T=77\text{K}$ ). From the view of electron wave mechanics, taking into account the electron wave reflections at the interface between the well and the potential barrier layer, we discuss the electronic states above the barriers in a GaAs/AlGaAs superlattice. This paper presents a new method on calculating the breadth of the microband, and the calculated microband breadth of GaAs/AlGaAs superlattice is in good agreement with the experimental results.

**Key words:** superlattice; electron states; microband breadth; calculation method

**PACC:** 7240; 7865

**Article ID:** 0253-4177(2006)01-0059-04

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 69976016)

† Corresponding author. Email: helijun4@126.com

Received 15 July 2005, revised manuscript received 23 September 2005

© 2006 Chinese Institute of Electronics