

# Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si(001) 量子阱的电子 结构及光跃迁\*

徐 至 中

(复旦大学 物理系 上海 200433)

**摘要** 采用包络函数方法及 Kronig-Penny 模型计算了量子阱 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si(001) 的电子结构。对量子阱的光跃迁几率进行了估算，并讨论了量子阱参数的最佳选择。

**PACC:** 7340L; **EEACC:** 4260D

## 1 引言

由于外延技术的进步，已能在 Si 或 GeSi 合金的衬底上生长出高质量的晶格常数不相匹配的 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si 异质结量子阱及超晶格。因为这种异质结构能与标准的硅工艺相兼容，因此特别引起人们的注意。利用这种异质结构可以制作许多新型的高性能器件，诸如调制掺杂晶体管<sup>[1,2]</sup>，异质结双极晶体管<sup>[3,4]</sup>，共振隧道二极管<sup>[5,6]</sup>，及负阻场效应晶体管<sup>[7]</sup>等。而更引起人们兴趣的是它在作为光器件上的应用。由于 GeSi 合金的能隙正处于通常硅光纤通讯的最低损耗的波长区 1.3—1.5 μm，因此常被用来制作与硅光纤配套使用的光检测器<sup>[8]</sup>。同时，利用量子阱中子带间的光跃迁，也被用来制作成长波长的红外摄像器件<sup>[9,10]</sup>。近来，人们也希望用它来制作发光器件。由于 Si 具有间接能隙结构，因此发光效率很低。起初，人们寄希望于超晶格的布里渊区折叠而得准直接能隙，从而提高光的发射能力<sup>[11,12]</sup>，但是至今在实验上都没有得到成功<sup>[13]</sup>。而与此同时，人们却发现生长在 Si(001) 衬底上的 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si 量子阱可以产生较强的无声子参与的、不需要满足准动量守恒的光发射峰<sup>[14-16]</sup>。这种发光的产生来源于 GeSi 合金中的无序涨落。Weber 和 Alonso 在 GeSi 体合金中也观察到了这种由于合金的无序涨落而产生的无需声子参与的发光<sup>[17]</sup>。Robbins、Calcott 及 Leong 等已用 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si 量子阱制作成发光二极管，在电注入的情况下，观察到较强的带间复合发光<sup>[18,19]</sup>。本文从 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si(001) 量子阱的电子能带结构着手，对合金层的光跃迁几率进行了估算。讨论了光跃迁几率与合金组分 x、合金层及硅层厚度间的变化关系。希望能对 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si 量子阱发光器件的设计及研制工作提供一些理论依据。

\* 国家自然科学基金资助项目  
1992 年 12 月 31 日收到本文

## 2 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ 量子阱的电子能带结构

根据光吸收测量的实验数据及畸变势常数计算结果,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  系统中势阱材料  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金间接能隙可表示成<sup>[20]</sup>

$$E_g(x) = E_0 - 0.96x + 0.43x^2 - 0.17x^3(\text{eV}), \quad (1)$$

这里,  $E_0 = 1.12\text{eV}$  是硅的禁带宽度。根据 Walle 及 Martin 的理论计算结果<sup>[21]</sup>, 生长在  $(001)\text{-Si}$  衬底上的 Ge 薄膜, Ge 与 Si 之间的价带边不连续值 (Band-offset) 为  $0.84\text{eV}$ 。对于  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金与 Si 之间的价带边不连续值, 可近似地假设与合金组分  $x$  成正比:

$$\Delta E_s(x) = 0.84x. \quad (2)$$

由于  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  的晶格常数与 Si 不同, 因此在 Si(001) 衬底上生长的  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  薄层内存在有应变。在与界面相平行的方向上, 其晶格发生收缩, 而在垂直方向上晶格发生伸长。应变使  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金的对称性由原来的立方对称下降成四角对称。这样原来相互等价的处在  $\Delta$  轴上的六个导带能谷, 应变后变得不再等价。根据畸变势常数计算可知, 处在  $z$  轴上的两个  $\Delta_z$  能谷的能量高于其它四个能谷  $\Delta_x(\Delta_z)$  的能量。而(1)式给出的禁带宽度应对应于  $\Delta_x(\Delta_z)$  能谷至价带顶间的距离。根据(1)及(2)式可得  $\Delta_x(\Delta_z)$  能谷值(取 Si 的导带底为能量零点):

$$\begin{aligned} E_c(\Delta_z) &= -E_0 + E_g(x) + \Delta E_s(x) \\ &= -0.12x + 0.43x^2 - 0.17x^3, (\text{eV}) \end{aligned} \quad (3)$$

而  $\Delta_z$  能谷的值则应根据  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金层的应变大小和它的畸变势常数进行计算。合金层在界面方向上的晶格常数  $a_{\perp}$  与硅的晶格常数  $a_{\text{Si}}$  相同, 而在垂直界面方向上的晶格常数  $a_z$  由合金的弹性常数  $c_{11}, c_{12}$  决定<sup>[22]</sup>:

$$a_z = a_x \left[ 1 - \frac{2c_{12}}{c_{11}} \frac{a_{\text{Si}} - a_x}{a_x} \right], \quad (4)$$

这里  $a_x$  是合金  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  的晶格常数, 并近似地认为与合金组分  $x$  成线性关系:

$$a_x = x a_{\text{Ge}} + (1 - x) a_{\text{Si}}. \quad (5)$$

同样, 合金的弹性常数  $c_{11}, c_{12}$  也近似地认为与合金组分  $x$  成线性关系, 由 Ge 及 Si 的弹性常数作线性平均得到。这样, 合金层内的应变张量可由下式给出:

$$\left. \begin{aligned} e_{zz} &= \frac{a_{\perp} - a_z}{a_z} = \frac{a_{\text{Si}} - a_x}{a_x} \\ e_{xx} &= \frac{a_z - a_x}{a_x} \end{aligned} \right\}, \quad (6)$$

而  $\Delta_z$  能谷与  $\Delta_x(\Delta_z)$  能谷间的能级分裂值应由下式给出:

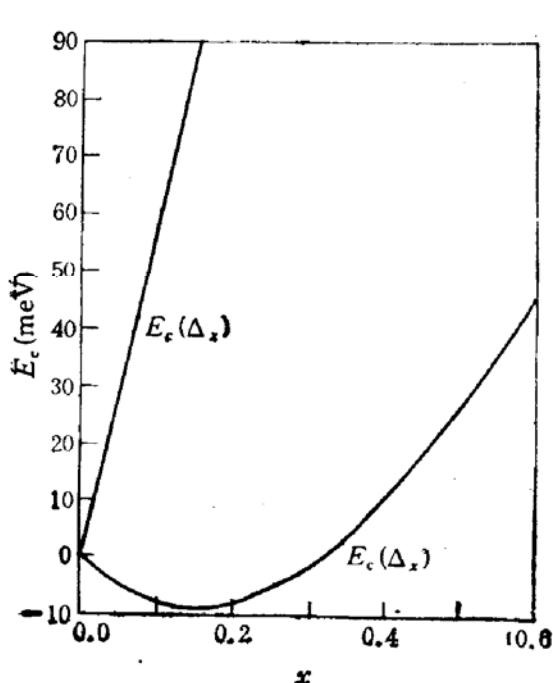
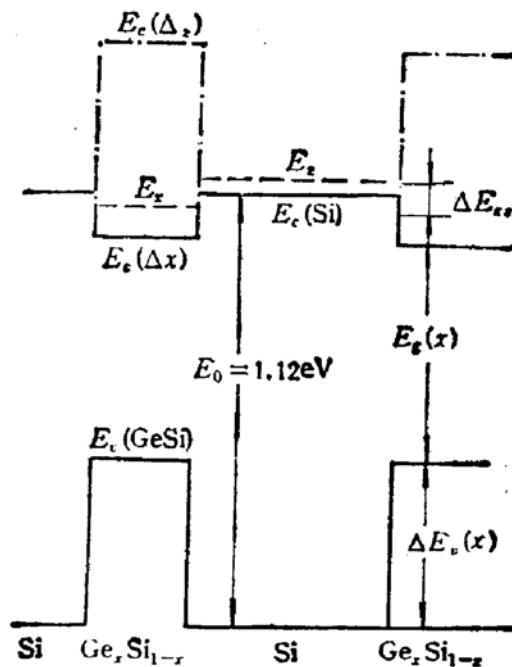
$$\Delta E_c = E_c(\Delta_z) - E_c(\Delta_x) = \nu_a^{\Delta} (e_{zz} - e_{xx}), \quad (7)$$

式中  $\nu_a^{\Delta}$  是合金导带底  $\Delta$  能谷的畸变势常数。由于缺乏 Ge 及  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金的畸变势常数  $\nu_a^{\Delta}$  的实验值, 因此这里近似地取用 Si 的实验数据:  $\nu_a^{\Delta} = 8.6\text{eV}$ 。其它各个参数的数值已在表 1 列出。根据(4)–(7)式, 即可计算得  $\Delta_z$  能谷的值  $E_c(\Delta_z)$ 。

图 1 已给出了  $E_c(\Delta_z)$  及  $E_c(\Delta_x)$  的计算结果。从图中可以看到在  $x \leq 0.32$  范围内,

表 1 Si 与 Ge 的晶格常数  $a$ , 弹性常数  $c_{11}$  和  $c_{12}$  及电子、空穴有效质量  $m_e^*(\Delta_x)$ 、 $m_e^*(\Delta_z)$ 、 $m_h^*$ 

	$a(\text{\AA})$	$c_{11}$	$c_{12}$	$m_e^*(\Delta_x)$	$m_e^*(\Delta_z)$	$m_h^*$
Si	5.427	16.58	6.39	0.1905	0.9163	0.49
Ge	5.658	12.85	4.83	0.2	0.7991	0.29

图 1  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金的  $\Delta_x$  及  $\Delta_z$  导带底能谷值  $E_c(\Delta_x)$  及  $E_c(\Delta_z)$  与合金组分  $x$  间的关系图 2 在  $x < 0.32$  情况下, 量子阱  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  的电子能级图.  $E_x$ 、 $E_z$  分别表示  $\Delta_x$  及  $\Delta_z$  势阱中的基态能级

$E_c(\Delta_x) < 0$ , 即  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金层的  $\Delta_x$  谷导带底低于 Si 层的导带底。因为合金层的价带顶高于 Si 层的价带顶, 因此对  $\Delta_x$  能谷, 在  $x \lesssim 0.32$  范围内,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  构成了 I-型量子阱(如图 2 所示)。另方面, 从图 1 也可以看到, 不管  $x$  为何值,  $E_c(\Delta_x) > 0$ , 即  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金层的  $\Delta_x$  谷导带底始终高于 Si 层的导带底。因而不管  $x$  为何值, 对  $\Delta_z$  能谷,  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  始终是一个 II-型量子阱。图 2 示出了当  $x < 0.32$  时, 量子阱能级图的大致情况。这里实线表示  $\Delta_x$  量子阱的情况, 锁线表示  $\Delta_z$  量子阱的情况。当  $x > 0.32$  后,  $\Delta_x$  量子阱也将变成 II-型量子阱。由于在 II-型量子阱中, 电子与空穴的波函数交叠很小, 因此它的光发射几率也较小。所以这里我们只限于考虑  $x < 0.32$  的情况。

为了决定各个量子阱中的基态能级及其相应的波函数, 我们采用 Cho 及 Prucnal 提出的 Kronig-Penny 模型<sup>[23]</sup>进行了计算。对  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金层中的电子、空穴有效质量近似地认为与合金组分  $x$  成线性关系。Si 及 Ge 的电子有效质量 [ $m_e^*(\Delta_x) = m_e^*$ ,  $m_e^*(\Delta_z) = m_e^*$ ] 和空穴有效质量  $m_h^*$  也在表 1 中列出。

由于  $\Delta_x$  势阱的基态能级与  $\Delta_z$  势阱的基态能级通常都比较小 ( $\lesssim 12 \text{ meV}$ ), 因此在稍高的温度下, 就有部分电子占据  $\Delta_z$  势阱中的基态能级。所以当考虑量子阱的发光效率时, 也必须同时考虑  $\Delta_z$  势阱的能级以及由它所产生的光发射几率。

图 3 示出了  $\Delta_x$  势阱的基态能级  $E_x$  与  $\Delta_z$  势阱的基态能级  $E_z$  之差

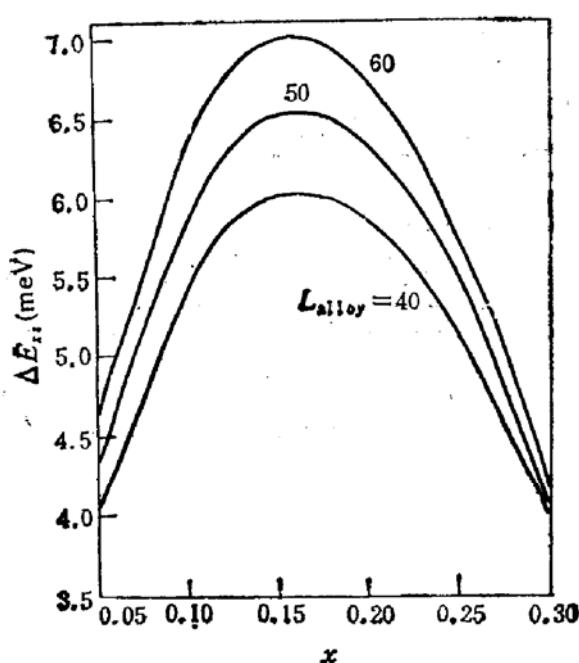


图3 当 Si 层的厚度  $L_{\text{Si}} = 100 \text{ \AA}$  时,  $\Delta_x$  势阱的基态能级与  $\Delta_z$  势阱的基态能级之差  $\Delta E_{xz}$  与合金组分  $x$  间的变化关系

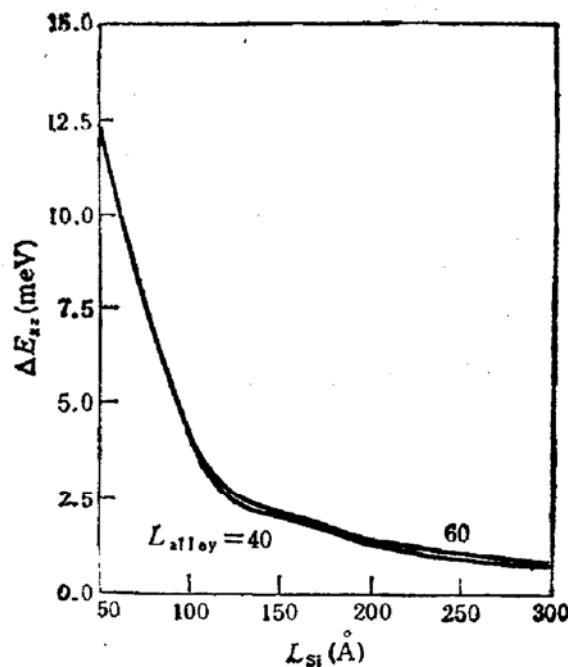


图4 当合金组分  $x = 0.3$  时,  $\Delta_x$  势阱的基态能级与  $\Delta_z$  势阱的基态能级之差  $\Delta E_{xz}$  与 Si 层厚度  $L_{\text{Si}}$  间的变化关系

$$\Delta E_{xz} = E_z - E_x$$

与合金组分  $x$  间的变化关系。这里已取 Si 层的厚度  $L_{\text{Si}} = 100 \text{ \AA}$ 。从图中可以看到,  $\Delta E_{xz}$  在  $x = 0.15$ — $0.20$  时, 具有极大值。随着  $x$  的变大或变小,  $\Delta E_{xz}$  逐渐下降。另方面, 在  $x = 0.15$ — $0.20$  附近, 随着合金层厚度  $L_{\text{alloy}}$  的变大,  $\Delta E_{xz}$  也有较大的增加。但当  $x$  变大或变小时, 随着  $L_{\text{alloy}}$  的变大,  $\Delta E_{xz}$  只有较小的增加。

图4给出了当合金组分  $x = 0.3$  时  $\Delta E_{xz}$  与 Si 层厚度  $L_{\text{Si}}$  间的变化关系。从图中可以看到随着  $L_{\text{Si}}$  的变大,  $\Delta E_{xz}$  很快下降, 而当  $L_{\text{Si}} > 100 \text{ \AA}$  以后, 变化就逐渐缓慢, 从图中也可以看到, 在合金组分  $x = 0.3$  的情况下,  $\Delta E_{xz}$  很少随合金层厚度  $L_{\text{alloy}}$  变化。对于  $L_{\text{alloy}} = 40 \text{ \AA}$ 、 $50 \text{ \AA}$  及  $60 \text{ \AA}$  三条曲线基本上重合在一起。

### 3 光跃迁几率的估算

在包络函数近似下,  $\Delta_x$  势阱、 $\Delta_z$  势阱及空穴势阱的基态波函数可分别写成

$$\phi_{e,\Delta_x}(r) = u_{e,\Delta}(r) e^{i(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{k}_{\Delta_x}) \cdot \mathbf{r}_\perp} f_{e,\Delta_x}(z)$$

$$\phi_{e,\Delta_z}(r) = u_{e,\Delta}(r) e^{i(\mathbf{k}_{\Delta_z})^2} e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} f_{e,\Delta_z}[z - (L_{\text{Si}} + L_{\text{alloy}})/2]$$

$$\phi_{v,r}(r) = u_{v,r}(r) e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} f_{v,r}(z)$$

这里已假定 Si 与 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub> 合金的导带底与价带顶处的 Bloch 函数相同。 $u_{e,\Delta}(r)$  是导带底处的 Bloch 函数的周期性函数部分; 而  $u_{v,r}(r)$  是价带顶处的 Bloch 函数。 $\mathbf{k}_\perp$  及  $\mathbf{r}_\perp$  是波矢与位矢在界面方向上的分量,  $\mathbf{k}_{\Delta_x}$  及  $\mathbf{k}_{\Delta_z}$  是 Si 或 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub> 的  $\Delta_x$  及  $\Delta_z$  谷导带底的波矢,  $|\mathbf{k}_{\Delta_x}| = |\mathbf{k}_{\Delta_z}| \approx 0.8 \left( \frac{2\pi}{a} \right)$ , [ $a$  是 Si 或 Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub> 的晶格常数]。 $f_{e,\Delta_x}(z)$ 、

$f_{e,\Delta_x}(z)$  及  $f_{s,r}(z)$  是电子与空穴的包络函数, 可按 Kronig-Penny 模型计算得到<sup>[23]</sup>, 考虑到包络函数是一个缓变函数, 因此带间跃迁的跃迁几率可近似表示成

$$I_x = A_x |\langle f_{e,\Delta_x}(z) | f_{s,r}(z) \rangle|^2,$$

$$I_s = A_s |\langle f_{e,\Delta_x}[z - (L_{Si} + L_{alloy})/2] | f_{s,r}(z) \rangle|^2,$$

这里  $A_x$  及  $A_s$  分别是与  $u_{e,\Delta}(r)e^{i(\mathbf{k}_\perp + \mathbf{k}_{\Delta_x}) \cdot \mathbf{r}_\perp}$  及  $u_{s,r}(r)e^{i(\mathbf{k}_\perp z + \mathbf{k}_{\Delta_x} \cdot \mathbf{r}_\perp)}$  间的动量矩阵元有关的量。很显然如果没有声子参与或其它缺陷散射,  $A_x = A_s = 0$ , 也即直接跃迁几率为零。但是如前所述, 由于合金内原子分布的无序涨落可以提供其跃迁时所需要的准动量守恒, 因此不需要声子参与也能产生光跃迁。Weber 及 Alonso<sup>[17]</sup> 已指出由无序涨落所引起的跃迁几率应与  $x(1-x)$  成正比, [ $x$  是合金的组分]。因此, 这里可近似地认为

$$A_x \approx A_s \approx Ax(1-x).$$

这样, 由  $\Delta_x$  势阱及  $\Delta_s$  势阱所产生的光跃迁几率可以近似地表示成

$$I_x \approx Ax(1-x)|\langle f_{e,\Delta_x}(z) | f_{s,r}(z) \rangle|^2,$$

$$I_s \approx Ax(1-x)|\langle f_{e,\Delta_x}[z - (L_{Si} + L_{alloy})/2] | f_{s,r}(z) \rangle|^2.$$

图 5 给出了当合金层厚度  $L_{alloy} = 40 \text{ \AA}$  时,  $\Delta_x$  势阱的光跃迁几率  $I_x$  与 Si 层厚度  $L_{Si}$  间的关系。图中给出  $x = 0.1, 0.2$  及  $0.3$  时的三条曲线。从图中可以看到, 合金组分  $x$  越大,  $I_x$  也越大。 $x = 0.3$  时的  $I_x$  差不多是  $x = 0.2$  时的 1.7 倍, 是  $x = 0.1$  时的 2.6 倍。而随着 Si 层厚度  $L_{Si}$  的增大,  $I_x$  随之逐渐下降。对  $x = 0.3$  的情况,  $L_{Si} = 100 \text{ \AA}$  时的  $I_x$  差不多是  $L_{Si} = 50 \text{ \AA}$  时的 0.86 倍, 是  $L_{Si} = 200 \text{ \AA}$  时的 1.14 倍。

图 6 给出了在 Si 层厚度  $L_{Si} = 100 \text{ \AA}$  的情况下, 单位合金层厚度的  $\Delta_x$  势阱光跃迁几率  $I_x/L_{alloy}$  与合金组分  $x$  间的变化关系。图中给出了  $L_{alloy} = 40, 50$  及  $60 \text{ \AA}$

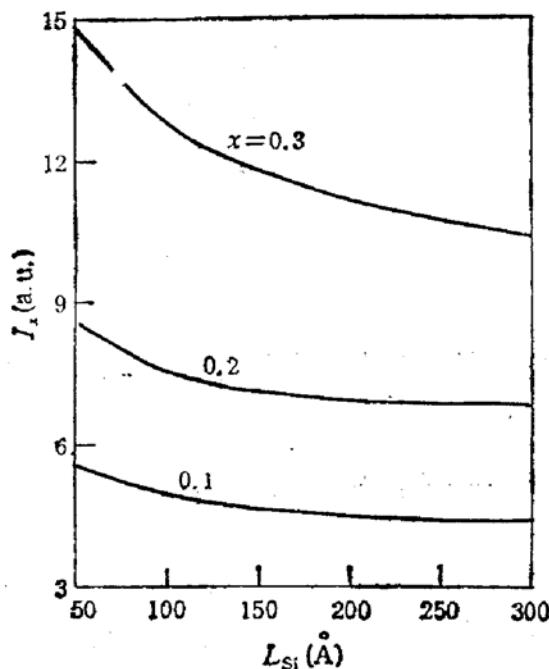


图 5 在合金层厚度  $L_{alloy} = 40 \text{ \AA}$  的情况下,  $\Delta_x$  势阱的光跃迁几率  $I_x$  与 Si 层厚度  $L_{Si}$  间的变化关系

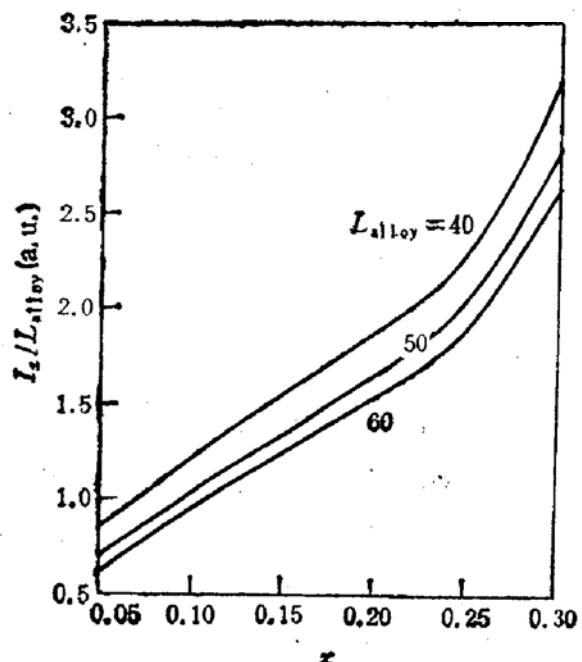


图 6 在 Si 层厚度  $L_{Si} = 100 \text{ \AA}$  情况下, 单位合金层厚度的  $\Delta_x$  势阱光跃迁几率  $I_x/L_{alloy}$  与合金组分  $x$  间的变化关系

时的三条曲线。从图中可以看到, 随着合金组分  $x$  的增加,  $I_x/L_{\text{alloy}}$  也随之增加。特别是当  $x > 0.25$  后, 增加的速率变得更快。另方面, 从图中也可以看到,  $L_{\text{alloy}}$  越小,  $I_x/L_{\text{alloy}}$  越大。在  $x = 0.3$  的情况下,  $L_{\text{alloy}} = 40 \text{ \AA}$  时的  $I_x/L_{\text{alloy}}$  差不多是  $L_{\text{alloy}} = 50 \text{ \AA}$  时的 1.12 倍, 是  $L_{\text{alloy}} = 60 \text{ \AA}$  时的 1.22 倍。但是从总的光跃迁几率  $I_x$  来说,  $L_{\text{alloy}}$  越小,  $I_x$  也越小。 $L_{\text{alloy}} = 40 \text{ \AA}$  时的  $I_x$  是  $L_{\text{alloy}} = 50 \text{ \AA}$  时的 0.9 倍, 是  $L_{\text{alloy}} = 60 \text{ \AA}$  时的 0.8 倍。

图 7 给出了在合金组分  $x = 0.3$  的情况下,  $\Delta_s$  势阱的光跃迁几率  $I_s$  与  $\Delta_a$  势阱的光跃迁几率  $I_a$  之比  $I_s/I_a$  与 Si 层厚度  $L_{\text{Si}}$  间的变化关系。图中示出了合金层厚度  $L_{\text{alloy}} = 40, 50$  及  $60 \text{ \AA}$  时的三条曲线。由于  $\Delta_s$  势阱的光跃迁几率  $I_s$  随着  $L_{\text{alloy}}$  的增大而下降, 因此随着  $L_{\text{alloy}}$  的增大,  $I_s/I_a$  有更快的增加。在  $L_{\text{Si}} = 100 \text{ \AA}$  的情况下,  $L_{\text{alloy}} = 40 \text{ \AA}$  时的  $I_s/I_a$  仅是  $L_{\text{alloy}} = 50 \text{ \AA}$  时的 0.76 倍, 是  $L_{\text{alloy}} = 60 \text{ \AA}$  时的 0.6 倍。另方面, 从图中可以看到,  $I_s/I_a$  随着 Si 层厚度  $L_{\text{Si}}$  的增加而增加。尽管  $I_s$  随着  $L_{\text{Si}}$  的增大而下降(见图 5), 但是由于  $I_s$  随着  $L_{\text{Si}}$  的增大而有更大的下降, 因而使  $I_s/I_a$  反而随之而上升。

#### 4 量子阱参数的选择

1) 合金组分  $x$ 。从图 5 及图 6 可以看到, 合金组分  $x$  对光跃迁几率  $I_x$  有较大的影响。 $x$  越大,  $I_x$  也越大。因此合金组分  $x$  应在  $x \leq 0.32$  范围内选择尽可能大的值。也即在保证  $\Delta_s$  势阱是 I-型量子阱的情况下, 选择尽可能大的值。另方面从图 3 可以看到, 随着  $x$  的变大, 使  $\Delta_s$  势阱与  $\Delta_a$  势阱的基态能级间距也变得更小。

2) 合金层厚度  $L_{\text{alloy}}$ 。从图 6 可以看到,  $L_{\text{alloy}}$  越小,  $I_x/L_{\text{alloy}}$  越大。因此应选择较小的  $L_{\text{alloy}}$ 。但是由图 7 可以看到,  $L_{\text{alloy}}$  的减小会使  $I_s/I_a$  变小。因此也不宜取得太小, 为了保证具有较大的  $I_x$ , 一般可取  $L_{\text{alloy}} = 40-50 \text{ \AA}$  左右。

3) Si 层厚度  $L_{\text{Si}}$ 。从图 5 可以看到, 随着  $L_{\text{Si}}$  的增大,  $I_s$  会发生下降。从这方面考虑,  $L_{\text{Si}}$  应选择较小的值。但是从图 7 可以看到,  $L_{\text{Si}}$  的减小, 会使  $I_s/I_a$  变小。而且从图 4 可见, 太小的  $L_{\text{Si}}$  会使  $\Delta_s$  势阱与  $\Delta_a$  势阱基态能级间距  $\Delta E_{ss}$  变大。所以一般取  $L_{\text{Si}} = 100-150 \text{ \AA}$  为宜。

4)  $\Delta_s$  势阱的影响。因为  $\Delta_s$  势阱是一个 II-型量子阱, 电子与空穴的波函数相互交叠较小, 因此  $\Delta_s$  势阱的光跃迁几率  $I_s$  一般只有  $\Delta_a$  势阱光跃迁几率  $I_a$  的 1%—

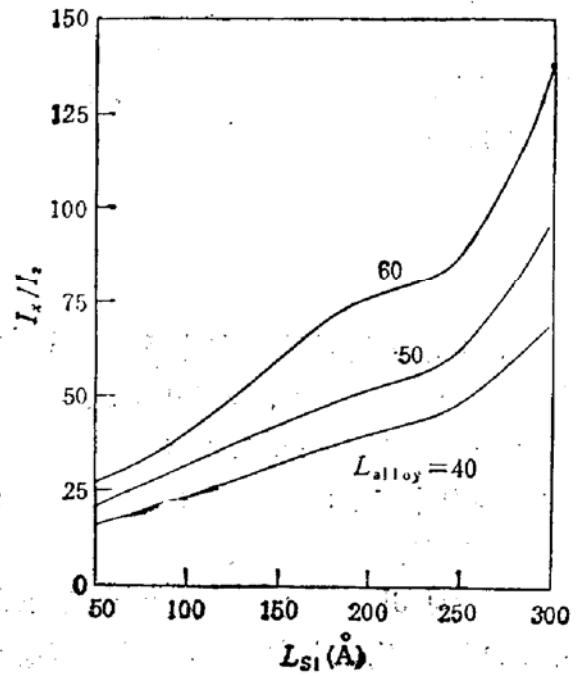


图 7 在合金组分  $x = 0.3$  的情况下,  $\Delta_s$  势阱的光跃迁几率与  $\Delta_a$  势阱的光跃迁几率之比  $I_s/I_a$  与 Si 层厚度间的变化关系

5%。(这里还没有考虑它们的态密度。因为在 Si 或  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  合金中只有二个简并  $\Delta_s$  能谷形成  $\Delta_s$  势阱;而  $\Delta_x$  势阱却有四个简并能谷。所以  $\Delta_x$  势阱的电子态密度应是  $\Delta_s$  势阱的二倍。如果考虑这一因素,  $I_s/I_x$  仅为 0.5%—2.5%.) 由于电子与空穴波函数交叠很小, 估计  $\Delta_x$  势阱中的非光辐射的复合几率也比较小。因此  $\Delta_x$  势阱中电子能级的占据并不会影响量子阱的光发射效率。从这方面考虑应要求两个势阱的基本能级尽可能靠近。也即要求  $\Delta E_{xz}$  越小越好, 以使它们发射出来的光波只形成一个波峰。若从这方面考虑, 由图 3 及图 4 可见, 应要求合金组分  $x$  具有尽可能大的值,  $L_{\text{Si}}$  不应太小, 应取 100—150 Å 为宜。

## 5 结论

我们采用包络函数的方法及 Kronig-Penney 模型计算了  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  的电子能带结构, 估算了它的光跃迁几率, 对量子阱的参数选择进行了讨论。可得下面结论:

- 1) 在合金组分  $x \lesssim 0.32$  范围内, 应选择尽可能大的合金组分  $x$ 。
- 2) 选择较小的合金层厚度  $L_{\text{alloy}}$ , 可得到较大的光跃迁几率, 一般以选择  $L_{\text{alloy}} = 40$ —50 Å 为宜。
- 3) 大的 Si 层厚度  $L_{\text{Si}}$ , 可使光跃迁几率下降, 但是过小的  $L_{\text{Si}}$  可使  $I_s/I_x$  变小, 另方面也使  $\Delta E_{xz}$  变大, 一般以选择  $L_{\text{Si}} = 100$ —150 Å 为宜。

**致谢** 本工作是在王迅教授领导下进行。作者也感谢谢希德、张开明及陆栋等教授对本工作的支持和鼓励。

## 参 考 文 献

- [1] T. P. Pearsall and J. C. Bean, IEEE Electron Device Lett. 1986, 7: 308.
- [2] H. Daembkes, H. J. Herzog, H. Jorke, H. Kibbel, and E. Kasper, IEEE Electron Device Lett. 1986, 33: 633.
- [3] T. Tatsumi, H. Hirayama, and N. Aizaki, Appl. Phys. Lett., 1988, 52: 895.
- [4] H. Temkin, J. C. Bean, A. Antreasian, and R. Leibenguth, Appl. Phys. Lett., 1988, 52: 1089.
- [5] U. Konig, M. Kuisl, J. F. Luy, and F. Schaffler, Electron. Lett., 1989, 25: 1169.
- [6] S. S. Rhee, G. K. Chang, T. K. Carns, and K. L. Wang, Appl. Phys. Lett., 1990, 56: 1061.
- [7] Piotr M. Mensz, S. Luryi, J. C. Bean, and C. J. Buescher, Appl. Phys. Lett., 1990, 56: 2663.
- [8] H. Temkin, T. P. Pearsall, J. C. Bean, R. A. Logan, and S. Luryi, Appl. Phys. Lett., 1986, 48: 963.
- [9] T. L. Lin and J. Maserjian, Appl. Phys. Lett., 1990, 57: 1422.
- [10] B. Y. Tsauer, C. K. Chen, and S. A. Marino, IEEE Electron Device Lett. 1991, 12: 293.
- [11] T. P. Pearsall, J. Bevk, L. C. Feldman, J. M. Bonar, J. P. Mannaerts, and A. Ourmazd, Phys. Rev. Lett., 1987, 58: 729.
- [12] M. S. Hybertsen, M. Schluter, R. People, S. A. Jackson, D. V. Lang, T. P. Pearsall, J. C. Bean, T. M. Vandenberg, and J. Bevk, Phys. Rev. 1988, B37: 10195.
- [13] G. Abstreiter, Thin Solid Films, 1989, 183: 1.
- [14] J. P. Noel, N. L. Rowell, D. C. Houghton, and D. D. Perovic, Appl. Phys. Lett., 1990, 57: 1037.
- [15] K. Terashima, M. Tajima, and T. Tatsumi, Appl. Phys. Lett., 1990, 57: 1925.
- [16] J. C. Sturm, H. Manoharan, L. C. Lenchyshyn, M. L. W. Thewalt, N. L. Rowell, J. P. Noel, and D. C. Houghton, Phys. Rev. Lett., 1991, 66: 1362.

- [17] J. Weber and M. I. Alonso, Phys. Rev., 1989, **B40**: 5683.
- [18] D. J. Robbins, P. Calcott, and W. Y. Leong, Appl. Phys. Lett., 1991, **59**: 1350.
- [19] J. P. Noel *et al.*, Appl. Phys. Lett., 1991, **59**: 1350.
- [20] J. C. Bean, Proc. IEEE, 1992, **80**: 571.
- [21] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, Phys. Rev., 1986, **B34**: 5621.
- [22] J. Hornstra and W. J. Bartels, J. Crys. Growth, 1978, **44**: 513.
- [23] Hung-Sik Cho and P. R. Prucnal, Phys. Rev., 1987, **B36**: 3237.

## Electronic Structure and Optical Transitions of $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ Quantum Well

Xu Zhizhong

(Department of physics, Fudan university, Shanghai 200433)

**Abstract** Using the envelope function method, the electronic structure of quantum wells  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  is calculated in Kronig-Penny model. The optical transition probability of the quantum wells is estimated and the optimal determination for the parameters of quantum wells is discussed.

**PACC:** 7340L; **EEACC:** 4260D