

一维超晶格的子能带和光跃迁

夏建白 黄 昆

(中国科学院半导体研究所)

1987年3月16日收到

用有效质量理论讨论了无限势阱和有限势阱中一维量子阱和超晶格的子能带和光跃迁。计算了势阱宽度 w_x 和 w_y 不同比值下, 无限势阱中空穴的无量纲量子能级以及有限势阱中的两组空穴子带。讨论了准一维情形 ($w_x \ll w_y$) 和一维情形 ($w_x \approx w_y$) 下量子能级的性质和光跃迁的选择规律。

一、引言

自从 1969 年 Esaki 和 Tsu 提出半导体超晶格以来, 随着分子束外延等技术的发展, 半导体量子阱和超晶格无论在实验上和理论上都得到了广泛的研究, 并逐渐在器件中得到应用^[1]。这里所说的量子阱和超晶格都是指二维的, 也就是粒子在一个方向上受到约束, 在另外两个方向上是自由运动的。在 1980 年左右, 开始了对超细一维半导体线结构的研究。Sakaki 在理论上提出, 利用 V 形槽 MOSFET 结构可得到一等价的超细半导体线^[2], 门电压将在夹在 p-GaAlAs 层中的 p-GaAs 层的 V 槽表面感应一细的 n-型反型线。他还论证了这种新的结构可以更有效地减小库仑散射, 使迁移率超过 $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。Skocpol 等人利用制造微金属丝技术, 制造了通道宽度在 100 至 150nm 之间的 MOSFET^[3]。低温下电导率的测量发现当温度低于 30K 时, 电导率随温度有一个非金属性的减小。这是二维器件所没有的, 但与一维局域化和相互作用理论的预言符合得很好, 证实了它的一维特性。Petroff 等人利用分子束外延和微光刻、腐蚀技术第一次将二维 GaAs-Ga_{0.75}Al_{0.25}As 量子阱改造成一维多量子阱结构^[4], 截面积为 $4 \cdot 10^4$ 至 10^6 \AA^2 。在这一维结构上还观察到了阴极发光谱(CL)。最近, Kash 等人宣称他们首次得到了准零维和一维结构的发光激发谱^[5]。在体 GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As 多量子阱材料上(阱宽为 60\AA), 用电子束刻印和各向异性腐蚀技术产生了一系列的“山脊”(Ridges) 或“柱”(posts), 分别对应于一维和零维结构。它们的横向宽度为 400\AA 至 1000\AA 。

总之到目前为止, 在实验上还没有制造出理想的一维超晶格或量子阱, 光谱和输运实验还刚开始。在理论上, 关于一维电子气输运性质的研究已有一些, 但是一维量子阱或超晶格的量子子带和光跃迁的研究还没有。本文将从理论上用有效质量理论分析一维超晶格的量子子能带和光谱特性, 并与二维超晶格作相应的比较。本文安排如下: 第二节为无限势阱中的一维电子、空穴子带和光跃迁, 第三节为有限势阱中的一维电子、空穴子带和光跃迁, 第四节为结论。

二、无限势阱中的一维电子、空穴子带

假设无限势阱在 x 和 y 方向, 宽度分别为 W_x 和 W_y , 因此粒子在 x 方向的运动是自由的。电子的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m^*} p_x^2. \quad (1)$$

(本文采用原子单位)。可以证明, 一维电子的波函数为,

$$\psi_e(r) = e^{ik_x x} f_n(x) g_m(y), \quad (2)$$

其中,

$$f_n(x) = \sqrt{\frac{2}{W_x}} \cdot \begin{cases} \cos nKx & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sin nKx & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (3)$$

$$K = \frac{\pi}{W_x}$$

$$g_m(y) = \sqrt{\frac{2}{W_y}} \cdot \begin{cases} \cos mK'y & m = 1, 3, 5, \dots \\ \sin mK'y & m = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (4)$$

$$K' = \frac{\pi}{W_y}$$

子带能量为,

$$E_{nm}(k_x) = \frac{1}{2m^*} [k_x^2 + (nK)^2 + (mK')^2]. \quad (5)$$

当 $k_x = 0$ 时, 形成一系列子能级, 最低的为 E_{11} , 其次 $E_{12}, E_{21}, E_{22}, \dots$ 。当 $k_x \neq 0$ 时, 每一个子能级就形成一子能带。

空穴的有效质量哈密顿为

$$H = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} p_1 & Q & R & 0 \\ Q^* & p_2 & 0 & R \\ R^* & 0 & p_3 & -Q \\ 0 & R^* & -Q^* & p_1 \end{vmatrix} \quad (6)$$

$$p_1 = (\gamma_1 + \gamma_2)(p_x^2 + p_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)p_z^2,$$

$$p_2 = (\gamma_1 - \gamma_2)(p_x^2 + p_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)p_z^2,$$

$$Q = -i2\sqrt{3}\gamma_3 p_z(p_x - ip_y),$$

$$R = \sqrt{3}[\gamma_2(p_x^2 - p_y^2) - i2\gamma_3 p_x p_y].$$

其中 p_x, p_y, p_z 分别为动量算符 \mathbf{p} 的三个分量。为简单起见, 我们讨论 $k_x = 0$ 的情形。这时 $Q = 0$, (6) 分解成两个等价的 2×2 矩阵。其中之一为,

$$H = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} p_1 & R \\ R^* & p_2 \end{vmatrix} \quad (7)$$

假设空穴波函数为,

$$\psi_k(r) = \sum_{nm} \left(\begin{array}{c} a_{nm} f_n(x) g_m(y) \\ b_{nm} f_n(x) g_m(y) \end{array} \right) \quad (8)$$

其中 f_n, g_m 分别为 (3) 和 (4)。因为 $\{f_n g_m\}$ 在无限势阱中组成了一完备正交基组，因此空穴波函数可展开成 (8) 的形式。哈密顿量 (7) 在基 $\{f_n g_m\}$ 之间的矩阵元为，

$$\begin{aligned} (H_{11})_{nn',mm'} &= \frac{1}{2} (\gamma_1 + \gamma_2) [(nK)^2 + (mK')^2] \delta_{nn'} \delta_{mm'} \\ (H_{22})_{nn',mm'} &= \frac{1}{2} (\gamma_1 - \gamma_2) [(nK)^2 + (mK')^2] \delta_{nn'} \delta_{mm'} \\ (H_{12})_{nn',mm'} &= \frac{\sqrt{3}}{2} \left\{ \gamma_2 [(nK)^2 - (mK')^2] \delta_{nn'} \delta_{mm'} \right. \\ &\quad \left. + i2\gamma_1 \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)_{nn'} \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)_{mm'} \right\} \end{aligned} \quad (9)$$

其中，

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)_{nn'} = \begin{cases} n'K \left[\frac{\sin(n+n')\frac{\pi}{2}}{(n+n')\frac{\pi}{2}} - \frac{\sin(n-n')\frac{\pi}{2}}{(n-n')\frac{\pi}{2}} \right] & n-n' = \text{奇数} \\ n'K \left[\frac{\sin(n+n')\frac{\pi}{2}}{(n+n')\frac{\pi}{2}} + \frac{\sin(n-n')\frac{\pi}{2}}{(n-n')\frac{\pi}{2}} \right] & n-n' = \text{偶数} \\ 0 & n-n' = \text{偶数} \end{cases} \quad (10)$$

$\left(\frac{\partial}{\partial y} \right)_{mm'}$ 也类似，只需将其中的 K 换成 K' 。

解久期方程，可以得到无限势阱中一维空穴的子能级 ($k_s = 0$)，它们是二重简并的。表 1 是 GaAs 的计算结果。在表 1 中我们取能量单位为 $\frac{1}{2} K^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{W_s} \right)^2$ ，因此能级位置与 W_s 无关，只与 $\left(\frac{W_s}{W_s} \right)$ 有关。

在二维超晶格或量子阱中，空穴子能级 ($k_s = 0$) 都有明确的含义，分别属于重空穴或轻空穴，例如 $HH1, HH2, LH1, \dots$ 等等。但是在一维情况下，由于重、轻空穴的混合，每一量子能级的含义不很清楚。以 $W_s/W_s = 1/10$ 和 $W_s/W_s = 1$ 的情形为例，我们写出前几个量子能级的波函数的主要分量于表 2。由表 2 可见，对于 $W_s \ll W_s$ 的情形，态的分类还是清楚的。因为这时 $K \gg K'$ ，重、轻空穴的波函数分别为，

$$\psi_{hk} \cong \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} e^{i(Kx+K'y)}, \quad \psi_{lk} \cong \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} e^{i(Kx+K'y)} \quad (11)$$

表 1 无限势阱中, GaAs 的一维空穴能级 ($k_z = 0$) 位置*. 能量单位: $\frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{W_x} \right)^2$

W_x/W_y	1/ ∞	1/10	1/5	1/3	1/2	1/1.5	1/1
1	2.650	2.723	2.938	3.438	4.364	5.536	8.203
2	10.600	2.938	3.758	5.350	6.919	7.999	10.851
3	11.050	3.288	4.918	6.558	7.841	9.523	13.590
4	23.850	3.758	5.873	7.341	10.345	12.918	18.648
5	42.400	4.322	6.386	8.648	10.920	13.602	22.440
6	44.200	4.920	6.910	8.853	11.012	15.711	23.105
7	66.250	5.565	7.683	9.818	14.671	18.094	24.030
8	95.400	6.792	8.423	10.996	15.858	20.559	30.935

* 表中 $W_x/W_y = 1/\infty$ 实际上给出的是二维子带, 与其它各行并不对应, 例如, 第二行给出的是位于 2.65 的第一个二维子带基础上形成的各准一维子带。

表 2 一维空穴能级波函数的主要分量

W_x/W_y	$1/10(K' = \frac{1}{10}K)$	$1/1(K' = K)$
1	$\begin{pmatrix} 0.50i \\ -0.87i \end{pmatrix} f_1 g_1$	$\begin{pmatrix} 0 \\ -0.98i \end{pmatrix} f_1 g_1$
2	$\begin{pmatrix} -0.48 \\ 0.87 \end{pmatrix} f_1 g_2$	$\begin{pmatrix} -0.36 \\ -0.59 \end{pmatrix} f_1 g_2 + \begin{pmatrix} -0.36i \\ 0.59i \end{pmatrix} f_2 g_1$
3	$\begin{pmatrix} -0.46i \\ 0.88i \end{pmatrix} f_1 g_3$	$\begin{pmatrix} -0.82i \\ 0 \end{pmatrix} f_1 g_3 + \begin{pmatrix} 0 \\ 0.50 \end{pmatrix} f_2 g_2$
4	$\begin{pmatrix} 0.42 \\ -0.90 \end{pmatrix} f_1 g_4$	$\begin{pmatrix} -0.02 \\ 0.60 \end{pmatrix} f_1 g_4 + \begin{pmatrix} 0.02i \\ -0.60i \end{pmatrix} f_2 g_1 + \begin{pmatrix} 0.24i \\ 0.25i \end{pmatrix} f_2 g_3 + \begin{pmatrix} -0.24 \\ 0.25 \end{pmatrix} f_3 g_2$
5	$\begin{pmatrix} -0.36i \\ 0.92i \end{pmatrix} f_1 g_5$	$\begin{pmatrix} 0.24i \\ 0.54i \end{pmatrix} f_1 g_5 + \begin{pmatrix} -0.24i \\ 0.54i \end{pmatrix} f_3 g_1 + \begin{pmatrix} 0.40 \\ 0 \end{pmatrix} f_4 g_3$
6	$\begin{pmatrix} -0.26 \\ 0.93 \end{pmatrix} f_1 g_6$	$\begin{pmatrix} -0.52i \\ 0 \end{pmatrix} f_1 g_6 + \begin{pmatrix} 0 \\ -0.50 \end{pmatrix} f_2 g_2 + \begin{pmatrix} 0.28i \\ -0.35i \end{pmatrix} f_3 g_1 + \begin{pmatrix} 0.28i \\ 0.35i \end{pmatrix} f_4 g_3$

因此这些能级相当于重空穴的驻波, 在 x 方向有零个节点, 在 y 方向分别有 0, 1, 2, … 个节点。由表 1 第一列可见, 二维空穴 ($W_x/W_y = 1/\infty$) 的第二个能级远远高出这些能级, 因此这些能级可看作是二维超晶格中第一重空穴带在 y 方向又量子化的结果。对于 $W_x \approx W_y$ 的情形, 情况比较复杂。由表 2 可见, 波函数是一级数展开, 不像电子态那样, 有确定的量子数 (n, m) (见(2)式)。但是我们取其中最大一项的 (n, m) 来标志每一个空穴态, 这样, 最低 6 个态分别为 (11), (12), (11), (12), (13) 和 (22)。另外, 对某一个态来说, 展开级数中所有项 $(n+m)$ 的奇偶性都是相同的。我们可以按这些态 $(n+m)$ 的奇偶性分别称它们为奇态或偶态。

由表 2 可以直接计算在无限势阱中一维粒子的光跃迁矩阵元平方，

$$Q_{nn'} = \frac{2}{m_e} |\vec{\varepsilon} \cdot \langle \phi_{en} | \vec{p} | \phi_{en'} \rangle|^2 \quad (12)$$

其中 $\vec{\varepsilon}$ 是偏振方向。因为空穴有效质量波函数的基函数为(见(7))，

$$\varphi_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow, \quad \varphi_{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow] \quad (13)$$

空穴波函数可写为，

$$\phi_h = \sum_{nm} \begin{pmatrix} a_{nm} f_n g_m \\ b_{nm} f_n g_m \end{pmatrix} \varphi_{\pm n} \quad (14)$$

电子波函数为

$$\phi_e = f_n g_m |s\sigma\rangle \quad (15)$$

σ 为自旋分量。考虑到电子态自旋可以有正、负两个分量，求得，

$$\begin{aligned} \langle \phi_e | P_x | \phi_h \rangle &= \frac{P}{\sqrt{2}} \left(a_{nm} + \frac{b_{nm}}{\sqrt{3}} \right) \\ \langle \phi_e | P_y | \phi_h \rangle &= \frac{iP}{\sqrt{2}} \left(a_{nm} - \frac{b_{nm}}{\sqrt{3}} \right) \\ \langle \phi_e | P_z | \phi_h \rangle &= \frac{2P}{\sqrt{6}} b_{nm} \end{aligned} \quad (16)$$

其中，

$$P = \langle s | P_x | x \rangle = \langle s | P_y | y \rangle = \langle s | P_z | z \rangle \quad (17)$$

是与材料有关的参量。对 GaAs，我们取 $\frac{P^2}{2m_e} = 18.17 \text{ eV}$ 。表 3 和表 4 列出了 $W_z/W_s = 1$

情形下，最低几个量子态之间的光跃迁矩阵元平方的 z 分量和 x 分量 (y 分量和 z 分量是等价的)。计算中考虑到空穴态是二重简并的，因此将结果乘以 2。

表 3 一维 GaAs 无限势阱中的光跃迁矩阵元平方的 z 分量。单位: eV, $W_z = W_s$ 。

空穴 n' \\ 电子 n	1(11)	2(12)	3(11)	4(12)	5(13)	6(22)
1 (11)	23.20	0	0	0	0	0
2 (21)	0	8.57	0	8.82	0	0
3 (12)	0	8.57	0	8.82	0	0
4 (22)	0	0	5.98	0	0	6.09

由表可见，选择定则与初态和末态的奇偶对称性有关，只有对称性相同的态之间才有跃迁。此外， $n = 1$ 空穴态至 $n = 1$ 电子态的 z 分量很强， x 分量较小，而 $n = 3$ 空穴态至 $n = 1$ 电子态的 z 分量很强， x 分量为零。值得注意的是在 $W_z/W_s = 1/10$ 的情形下，对于最低几个重空穴子带至电子子带之间的跃迁，选择定则 $\Delta n = 0$ 大致成立，光学

表 4 一维 GaAs 无限势阱中的光跃迁矩阵元平方的 x 分量, 单位: eV, $W_x = W_y$.

空穴 n' 电子 n	1(11)	2(12)	3(11)	4(12)	5(13)	6(22)
1 (11)	5.80	0	12.30	0	0.18	4.94
2 (21)	0	0	0	2.42	0	0
3 (12)	0	8.97	0	2.00	0	0
4 (22)	0.49	0	1.51	0	2.89	1.52

矩阵元平方的 x 分量和 y 分量都接近于 $\frac{P^2}{2m_s}$ (18.17eV), 而 z 分量为零.

三、有限势阱中的一维电子、空穴子带和光跃迁

理想的一维超晶格截面应如图 1 所示: 白色区域为势阱(沿 z 方向延伸), 阴影区域为势垒, 它们在 $x-y$ 平面内是周期排列的. 取元胞如图中虚线所示, 宽度分别为 L_x 和 L_y , 则电子的哈密顿量为,

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + V(x, y) \quad (18)$$

其中 $V(x, y)$ 为势垒区产生的微扰,

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{W_x}{2}, |y| < \frac{W_y}{2} \\ V_1 & \frac{W_x}{2} < |x| < \frac{L_x}{2}, \\ & \frac{W_y}{2} < |y| < \frac{L_y}{2} \end{cases} \quad (19)$$

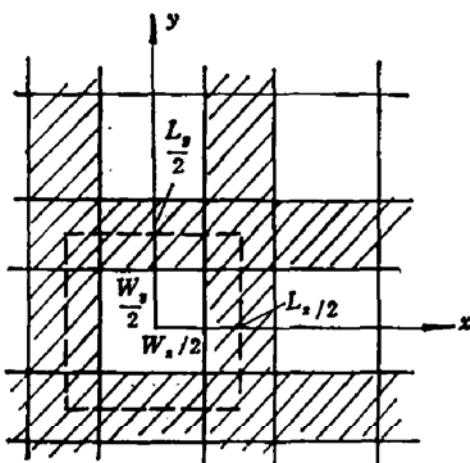


图 1 理想一维超晶格的截面图. 白色区域为势阱, 阴影区域为势垒

因为 $V(x, y)$ 不能写成 $V(x) + V(y)$ 的形式, 因此不能像无限势阱的情形那样, 作 x, y 分离变量处理. 令电子波函数为,

$$\psi_e(r) = e^{ik_x z} \cdot \sum_{n,m} a_{nm} f_n(z) g_m(y) \quad (20)$$

其中 $f_n(z)$, $g_m(y)$ 是平面波,

$$\begin{aligned} f_n(z) &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{inKz}, \quad K = \frac{2\pi}{L_x}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ g_m(y) &= \frac{1}{\sqrt{L}} e^{imK'y}, \quad K' = \frac{2\pi}{L_y}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (21)$$

哈密顿量 (18) 在基 $\{f_n g_m\}$ 之间的矩阵元为

$$(H)_{nn'm'm'} = \frac{1}{2m^*} [k_z^2 + (nK)^2 + (mK')^2] \delta_{nn'} \delta_{mm'} + V_{nn'm'm'}$$

$$V_{n,m,n',m'} = \begin{cases} V_1 \left(1 - \frac{W_x W_y}{L_x L_y}\right) & n = n', m = m' \\ -V_1 \frac{\sin(n-n')\pi \frac{W_x}{L_x} \sin(m-m')\pi \frac{W_y}{L_y}}{(n-n')\pi \cdot (m-m')\pi} & n \neq n', m \neq m' \\ -V_1 \frac{\sin(n-n')\pi \frac{W_x}{L_x} \cdot \frac{W_y}{L_y}}{(n-n')\pi} & n \neq n', m = m' \\ -V_1 \frac{\sin(m-m')\pi \frac{W_y}{L_y} \cdot \frac{W_x}{L_x}}{(m-m')\pi} & n = n', m \neq m' \end{cases} \quad (22)$$

一维超晶格空穴的哈密顿量为哈密顿量(6)加微扰势(19). 因为我们要计算 $k_z = 0$ 的子带, 因此必须考虑 4×4 的矩阵形式(6). 令空穴波函数为,

$$\psi_h(r) = e^{ik_z z} \sum_{n,m} \begin{pmatrix} a_{nm} f_n g_m \\ b_{nm} f_n g_m \\ c_{nm} f_n g_m \\ d_{nm} f_n g_m \end{pmatrix} \quad (23)$$

其中 f_n, g_m 为平面波(21). 哈密顿量矩阵元的计算是直截了当的.

我们计算了一维 GaAs-Al_{0.2}Ga_{0.8}As 超晶格的两组电子和空穴子能级 ($k_z = 0$), 连同二维超晶格的两组电子和空穴子能级 ($k_z = 0$) 分别示于表 5 和表 6. 计算所用的参数为: $r_1 = 6.85$, $r_2 = 2.1$, $r_3 = 2.9$. 势阱宽度: 第一组 $W_x = W_y = 150\text{Å}$, 第二组 $W_x = 150\text{Å}$, $W_y = 100\text{Å}$. 势垒宽度都是 150Å . 能带不连续性 $V_1 = 150\text{meV}$ (电子) 和 100meV (空穴).

表 5 一维和二维 GaAs-Al_{0.2}Ga_{0.8}As 超晶格的电子能级位置. 单位: meV.

n	一维		二维	
	$W_x, W_y = 150, 150\text{Å}$	$W_x, W_y = 150, 100\text{Å}$	$W_x = 150\text{Å}$	$W_x = 100\text{Å}$
1	31.45(11)	44.40(11)	15.71	28.60
2	77.20(21)	89.47(21)	61.20	106.62
3	77.20(12)	120.79(12)	126.65	162.00
4	121.37(22)	145.97(22)		
5	136.78(13)			

表 6 一维和二维 GaAs-Al_{0.2}Ga_{0.8}As 超晶格的空穴能级位置. 单位: meV.

n	一维		二维	
	$W_x, W_y = 150, 150\text{Å}$	$W_x, W_y = 150, 100\text{Å}$	$W_x = 150\text{Å}$	$W_x = 100\text{Å}$
1	9.30(HH11)	13.17	3.51(HH1)	7.02
2	14.59(HH12)	20.75	11.36(LH1)	20.48
3	15.40(LH11)	22.54	14.10(HH2)	27.88
4	20.90(HH12)	30.68	31.49(HH3)	61.03
5	27.99(LH22)	36.58	44.10(LH2)	75.71

由表 5 可见，在有限势阱中的一维电子态也像在无限势阱中一样，可看作在 x 和 y 方向上两个独立的二维电子态相乘，能量为二维电子态能量之和。表中括弧内的数字为相应的 x 和 y 方向量子态的量子数。

由表 6 可见，对空穴来说，一维能级与二维能级之间没有直接的联系，因此不能将一维空穴态看作是 x, y 方向上两个独立的空穴态相乘。如果用 $U, V, X, Y(k_x, k_y)$ 分别表示波矢为 k_x, k_y 的两个重空穴和两个轻空穴波函数（见[6]中(8)式），则一维空穴量子态的波函数(23)可表示为 U, V, X, Y 的线性组合，

$$\phi_h(r) = e^{ik_x z} \sum_{n,m} \begin{pmatrix} a'_{nm} U(nK, mK') \\ b'_{nm} V(nK, mK') \\ c'_{nm} X(nK, mK') \\ d'_{nm} Y(nK, mK') \end{pmatrix} \quad (24)$$

由每一个态波函数中所包含的 U, V, X, Y 的分量就可确定每个态的性质。例如在 $W_z = W, -150\text{\AA}$ 的情形下，由波函数中的主要分量可定出最低几个态的性质依次为 (HH),

(HH), (LH), (HH) 和 (LH)，见表 6 第一列。括弧中的数字则是与无穷势阱的空穴量子能级对照而得到的，它标志着态的奇偶对称性。

当 $k_x \approx 0$ 时，我们计算了一维超晶格的空穴子带， $W_z = W, -150\text{\AA}$ 和 $W_z = 150\text{\AA}, W, -100\text{\AA}$ 的结果分别示于图 2(a) 和 (b)。由图可见，子能带之间的交叉相互作用很多。

利用计算得到的空穴波函数(23)和电子波函数(20)，我们还计算了子带之间的光跃迁矩阵元平方 $Q_{nn'}$ (12)。 $k_x = 0, W_z = W, -150\text{\AA}$ 情形的最低几个子能级之间的 $Q_{nn'}$ 的 z 和 x 分量分别列于表 7 和表 8。比较表 7, 8 和表 3, 4 可以发现，在有限势阱和无限势阱的两种情形下，子能级之间的跃迁几率是基本相同的。由表可见，当电场平行于自由

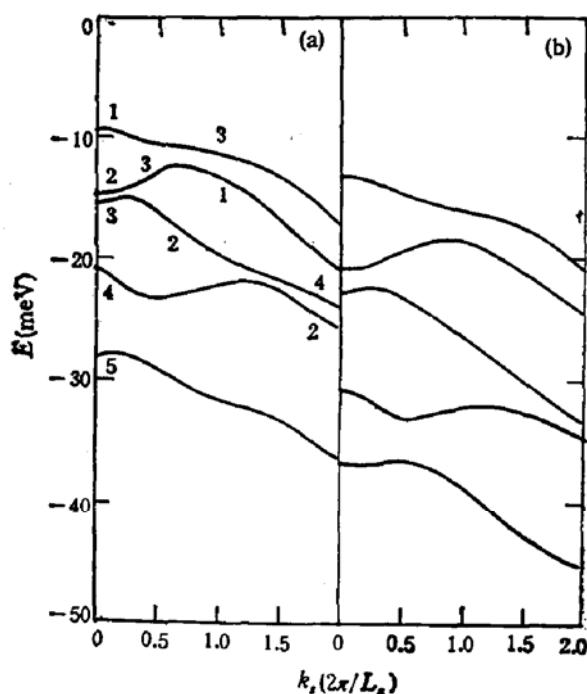


图 2 一维 GaAs-Al_{0.2}Ga_{0.8}As 超晶格的空穴子带
(a) $W_z = 150\text{\AA}, W_y = 150\text{\AA}$ ，
(b) $W_z = 150\text{\AA}, W_y = 100\text{\AA}$

方向，重空穴跃迁较强，当电场垂直于自由方向，轻空穴跃迁较强。表 9 和表 10 则列出了跃迁至 $n = 1$ 电子态的 $Q_{nn'}$ (z 和 x 分量) 随 k_x 的变化。对照图 2 可以发现由于子带之间的交叉， $Q_{nn'}$ 也在态之间发生突变。例如：表 10 中 $Q_{nn'}$ 在第二、三态之间的跳跃发生在 $k_x = 0.25 \left(\frac{2\pi}{L_z}\right)$ ，对应于图 2 中 2, 3 曲线的交叉。类似地表 9 中 $Q_{nn'}$ 在第一、二态之间的跳跃发生在 $k_x = 0.75 \left(\frac{2\pi}{L_z}\right)$ ，对应于 1, 3 曲线的交叉。因此在 $k_x = 2 \left(\frac{2\pi}{L_z}\right)$ ，

各个态的特性已依次改变为 (LH11), (HH11), (HH12), (HH12) 等。

表 7 一维 $\text{GaAs}-\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ 超晶格中光跃迁矩阵元平方的 z 分量。单位: eV, $W_x = W_y = 150 \text{ \AA}$ 。

空穴 n' 电子 n	1(HH11)	2(HH12)	3(LH11)	4(HH12)	5(LH22)
1 (11)	22.00	0	0	0	0
2 (21)	0	7.49	0	9.24	0
3 (12)	0	7.33	0	9.04	0
4 (22)	0	0	3.96	0	9.44

表 8 一维 $\text{GaAs}-\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ 超晶格中光跃迁矩阵元平方的 x 分量。单位: eV, $W_x = W_y = 150 \text{ \AA}$ 。

空穴 n' 电子 n	1(HH11)	2(HH12)	3(LH11)	4(HH12)	5(LH22)
1 (11)	5.51	0	13.80	0	4.07
2 (21)	0	0	0	2.27	0
3 (12)	0	7.74	0	2.30	0
4 (22)	0.64	0	0.99	0	2.35

表 9 $Q_{nn'}$ 的 z 分量随 k_x 的变化。单位: eV。

空穴 n' $k_x (\frac{2\pi}{L_x})$	0	0.25	0.5	1.0	1.5	2.0
1	22.00	20.64	16.94	0	0	0
2	0	0	0	8.92	4.80	2.86
3	0	0.85	2.79	3.06	0	0
4	0	0	0	0	0.99	0.31
5	0	0	0	0	0	0

表 10 $Q_{nn'}$ 的 x 分量随 k_x 的变化。单位: eV。

空穴 n' $k_x (\frac{2\pi}{L_x})$	0	0.25	0.5	1.0	1.5	2.0
1	5.51	5.16	4.24	10.69	10.78	10.77
2	0	12.14	11.06	2.23	1.20	0.72
3	13.80	0.21	0.70	0.68	0.08	0.08
4	0	0.93	0.22	0.05	0.25	0.08
5	4.07	4.58	5.75	0.46	0.56	0.47

已知光吸收系数

$$\alpha(\hbar\omega) \propto \frac{1}{\omega} \sum_{k_x} \sum_{n,n'} |\epsilon \cdot P_{nn'}(k_x)|^2 \delta(E_{n'}(k_x) - E_n(k_x) - \hbar\omega) \quad (25)$$

假设光跃迁矩阵元与 k_x 无关, 则光吸收系数与电子和空穴子带的联合态密度成正比。如果子带是抛物的, 具有有效质量 m^* , 则一维带的态密度为,

$$n(E) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{m^*}{2E}} \quad (26)$$

与二维超晶格相比, 二维子带的态密度是台阶型的, 吸收谱呈台阶型^①, 吸收峰是由激子产生的。在一维的情况, 由于态密度在 $E \sim 0$ 时是发散的, 因此本征吸收谱本身将出现一系列的峰。现具体考虑重空穴 ($HH11$) 态以及轻空穴 ($LH11$) 态至电子第一态 ($CB11$) 的跃迁。在 $W_x = W_y = 150\text{Å}$ 的情形, 由图 2(a) 曲线 1, 3 在 $k_x = 0$ 附近的能量色散可以求得重、轻空穴的有效质量分别为,

$$m_{hh}^* = 1.188, m_{lh}^* = -0.395 \quad (27)$$

电子的有效质量为 $m_e^* = 0.067$, 因此它们与电子的约化质量为,

$$m_{e-h}^* = 0.0634, m_{e-l}^* = 0.0807 \quad (28)$$

约化质量主要还是由电子决定。由表 6, 7 ($HH11$), ($LH11$) 至 ($CB11$) 的 $Q_{nn'}$ 分别为

$$Q_{nn'}(x) = 22.00\text{eV}, Q_{nn'}(z) = 13.80\text{eV} \quad (29)$$

因此可以预言, 对一维超晶格 ($W_x \approx W_y$) 将观察到两条强吸收峰, 一条的电场偏振沿自由方向 (x), 是重空穴与电子之间的跃迁, 另一条电场垂直于自由方向, 是轻空穴与电子之间的跃迁。前者的强度约是后者的两倍, 能量稍低。

四、结 论

本文利用有效质量理论讨论了无限势阱和有限势阱中一维量子阱和超晶格的子能带和光跃迁。对于量子阱两个方向上尺度相差很多的情形 ($W_x \ll W_y$), 可以先考虑在短方向上量子化, 产生一系列的重空穴或轻空穴子带, 然后再考虑在长方向上的量子化。由于在长方向上量子能级间距很小, 因此仅将原来的重空穴子带再进一步分裂成子带。这种情形可称为准一维情形。第二种情形是量子阱两个方向的尺度相当 ($W_x \approx W_y$), 这时将出现一些新的一维特性。在 $k_x = 0$, 电子的量子态可看作在 x, y 两个方向上的量子态相乘, 空穴的量子态则不能。由于重、轻空穴态的重新组合, 空穴量子态将依次具有 ($HH11$), ($HH12$), ($LH11$), ($HH12$), ($LH22$), … 的特性。在无限势阱的情形下, 我们求得 W_x 与 W_y 不同比值时 $k_x = 0$ 空穴的无量纲量子能级。在有限势阱的情形, 我们计算了 $W_x = W_y = 150\text{Å}$ 和 $W_x = 150\text{Å}, W_y = 100\text{Å}$ 两组空穴的一维子带。由于一维子带的态密度 $\propto 1/\sqrt{E}$, 因此它的本征吸收光谱将具有一系列尖锐峰。在准一维情形, 对最低几个重空穴子能级与电子子能级之间的跃迁, 选择定则 $\Delta n = 0$ 大致成立。电场平行于短方向的光跃迁矩阵元为零, 在其它两个方向上的基本相等。在一维情形, 跃迁只发生在对称性相同的态之间。当电场平行于自由方向, 重空穴的跃迁较强, 当电场垂直于自由方向, 轻空穴跃迁较强。

一维量子阱或超晶格在技术上可能会显示比二维超晶格更大的优越性。Sakaki^[2]已预言，一维选择掺杂超晶格将达到比二维超晶格更高的迁移率。我们可以期望，一维超晶格由于它的尖锐的光谱线，将能产生性能更好的半导体激光器。

参 考 文 献

- [1] L. Esaki, *IEEE QE-22*, 1611 (1986).
- [2] H. Sakaki, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **19**, L735 (1980).
- [3] W. J. Skocpol, L. D. Jackel, E. L. Hu, R. E. Howard and L. A. Fetter, *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 951 (1982).
- [4] P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.*, **41**, 635 (1982).
- [5] K. Kash, J. M. Worlock, A. Scherev, M. C. Tanargo, and H. G. Craighead, Second International Conference on Superlattices, F18, Göteborg (1986).
- [6] 汤蕙、黄昆, *半导体学报*, **8**, 1(1987).
- [7] R. Dingle, *Festkörperprobleme*, **15**, 23(1975).

Subbands and Optical Transitions in One-Dimensional Superlattices

Xia Jianbai and Huang Kun

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

Abstract

Subbands and optical transitions in one-dimensional quantum wells and superlattices are calculated on the basis of the Luttinger-Kohn effective mass theory. Dimensionless subband energy levels of holes in the infinite potential well are given for different ratios of the well width W_z and W_s . Two groups of hole subbands in the finite potential well are also given. Properties of quantum energy levels and selection rules of optical transitions are discussed in quasi 1-D ($W_z \ll W_s$) and 1-D ($W_z \approx W_s$) cases.