

# 量子阱结构中的等效宽度分析\*

周小平 周剑英 杨爱龄 李锡华 江晓清 王明华

(浙江大学信息与电子工程学系, 杭州 310027)

**摘要:** 在有效质量近似下, 分析了有限深势阱的电子基态能级, 并和有相同能级的无限深势阱模型作比较, 用数值方法得到了不同电场下两者之间的阱宽的关系, 首次得出经验公式, 发现结果与前人的实验和理论结果吻合得很好。分析了两种模型下的波函数和结合能, 证实了有外加电场时采用零电场下的等效宽度的合理性。

**关键词:** 量子阱; 等效宽度; 结合能; GaAs/GaAlAs

**PACC:** 7320D

中图分类号: O471.1

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2002)07-0725-06

变化两个角度加以考察。

## 1 引言

电场对 GaAs/GaAlAs 量子阱光学性质的影响已越来越引起人们的重视, 从简单的阶跃量子阱, 到渐变抛物量子阱<sup>[1,2]</sup>, 从单量子阱到各式的多量子阱<sup>[3~6]</sup>, 人们都从理论和实践两方面分析了电场对激子吸收峰的移动作用<sup>[7,8]</sup>。在诸多的分析方法中, 有两种模型经常被运用, 即 Matsumura<sup>[9]</sup>等人采用的无限深势垒模型和 Sanders<sup>[10]</sup>等人的有限深势阱模型。

显然, 在考虑电场对阱中电子和空穴的作用时, 采用简单的无限深势垒模型将引入很大的误差, 是不可取的。为此, Miller<sup>[11]</sup>采用了等效宽度法, 但他没有详细分析等效宽度的获得, 以及在不同电场下, 等效宽度的变化以及它们对分析的偏差, 关于这方面, 我们没发现相关报道。本文从基态下两种模型的能级相同的角度出发, 深入分析了上述问题, 还进一步得到了零电场的变化公式和有外加电场时等效宽度的变化。研究还表明: 外加电场对零场下的等效宽度改变很小, 因而即使在有外加电场的情形, 采用零场下的等效宽度近似, 仍可获得足够精确的结果。对此, 本文从波函数在势阱内的分布及激子结合能的

## 2 零电场下的等效宽度

设一处于有限深势阱中的粒子的电荷为  $q$  (对空穴为  $e$ , 对电子为  $-e$ ), 有效质量为  $m^*$ , 取 GaAs/GaAlAs 的量子阱生长方向为  $z$  方向, 阵宽为  $L$ 。在没有外加电场时, 粒子的哈密顿量为

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{d^2}{dz^2} + V \quad (1)$$

取势阱中心为原点, 有

$$V = \begin{cases} 0 & |z| < L/2 \\ v_0 & \text{其他} \end{cases} \quad (2)$$

如图 1 所示。

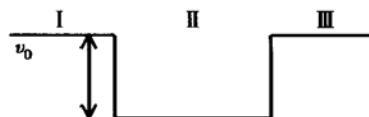


图 1 零电场导带示意图

Fig. 1 Conduct band in zero field

\* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 69877017)

得到在 I 、II 、III 区的包络函数分别是

$$\begin{aligned}\varphi_1 &= c \exp(k_1 z) \\ k_1 &= \sqrt{\frac{2m^*(v_0 - E)}{\hbar^2}}, E \text{ 为能量本征值} \quad \text{I 区} \\ \varphi_2 &= a \sin(k_2 z) + b \cos(k_2 z) \\ k_2 &= \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}} \quad \text{II 区} \\ \varphi_3 &= d \exp(-k_1 z) \quad \text{III 区} \end{aligned}\quad (3)$$

在势垒与势阱的有效质量接近的条件下, 由边界条件, 得到能量本征值方程:

$$k_1 = k_2 \operatorname{tg}(k_2 L/2) \quad n = 1, 3, 5 \dots \quad (4)$$

$$k_1 = -k_2 \operatorname{ctg}(k_2 L/2) \quad n = 2, 4, 6 \dots \quad (5)$$

$n$  对应不同能级. 基态下  $E_e \cdot L$  关系可由(4)式得到, 如图 2 所示. 其中,  $E_e$  是电子的基态能级.

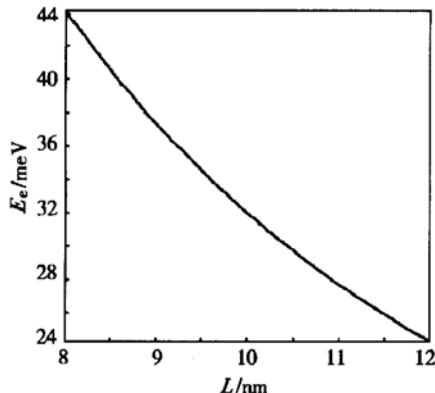


图 2 电子基态能级随阱宽的变化

Fig. 2 Ground state energy of electron as a function of well width

图 2 是针对导、价带的能级分裂比为 57: 43 得到的. 除非特别注明, 以下的讨论都针对这一分裂比. 设与之有相同  $E_e$  的无限深势阱的阱宽为  $L_{\text{eff}}$ , 则此时的包络函数

$$\varphi_{\text{inbm}} = \sqrt{\frac{2}{L_{\text{eff}}}} \cos\left(\pi \frac{z}{L_{\text{eff}}}\right) \quad -L_{\text{eff}}/2 \leq z \leq L_{\text{eff}}/2 \quad (6)$$

$$E_e = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{L_{\text{eff}}}\right)^2 \quad (7)$$

由此可得到电子的  $L_{\text{eff}} \cdot L$  关系, 并同理可得到轻、重空穴的结果, 如图 3 所示.

图中, 取势垒中 Al 的含量为 0.32, 电子势垒高度  $v_0 = 228 \text{ meV}$ , 空穴势垒高度为  $v_0 = 172 \text{ meV}$ , 可得

到经验公式(针对分裂比为 57: 43 情形, 统一单位为 nm):

$$\text{对电子: } y = 0.9839x + 3.419 \quad (8)$$

$$\text{对重空穴: } y = 0.9981x + 1.3951 \quad (9)$$

$$\text{对轻空穴: } y = 0.9874x + 3.0613 \quad (10)$$

其中  $x$  是有限深势阱模型阱宽;  $y$  是无限深势阱模型的等效宽度. 由公式可知, 轻空穴和电子的等效宽度比较接近, 和重空穴则相差甚远, 这与三者的有效质量差别有关. 令  $L = 10 \text{ nm}$ , 可得  $L_{\text{eff}} = 13.3$ (电子)、11.4(重空穴)、12.9(轻空穴), 与文献[11]的结果吻合得非常好.

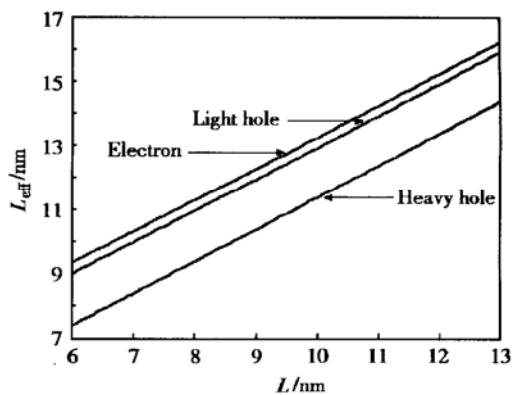


图 3 零电场下等效宽度随阱宽的变化

Fig. 3 Effective width as a function of the exact well width

文献[12]用变分法对零电场下的方势阱作了研究, 得到了等效宽度的显式公式, 我们的结果与该文献得到的轻空穴曲线非常接近. 但该作者没有考虑外加电场对公式的影响, 因而公式只适用在零电场下. 在下面的部分, 我们将对上述经验公式在外加电场下的变化作一详细分析, 并从波函数和激子结合能角度观察这种变化的影响.

### 3 外加电场下的等效宽度

当施加外加电场时, 有效质量近似下的哈密顿量变成

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{d^2}{dz^2} + V - qzF \quad (11)$$

$$V = \begin{cases} 0 & |z| < L/2 \\ v_0 & \text{其他} \end{cases} \quad (12)$$

利用微扰法, 把上述哈密顿量变成

$$H = H_0 + H' \quad (13)$$

$$H_0 = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{d^2}{dz^2} + v_0 + qLF/2 & \text{I 区} \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{d^2}{dz^2} - qzF & \text{II 区} \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \times \frac{d^2}{dz^2} + v_0 - qLF/2 & \text{III 区} \end{cases}$$

$$(14)$$

$$H' = \begin{cases} -qF(z + L/2) & \text{I 区} \\ 0 & \text{II 区} \\ -qF(z - L/2) & \text{III 区} \end{cases} \quad (15)$$

对  $H_0$ , 在 I 和 III 区, 有

$$\varphi_1 = c \exp(k_1 z)$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m^*(v_0 + qFL/2 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_3 = d \exp(-k_2 z)$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m^*(v_0 - qFL/2 - E)}{\hbar^2}} \quad (16)$$

$$\text{对 II 区, 令 } Z = -\left(\frac{2m^*}{(qF\hbar)^2}\right)^{1/3}(E + qFz) \quad (17)$$

可把薛定鄂方程化为

$$\frac{d^2\varphi}{dZ^2} - Z\varphi = 0 \quad (18)$$

利用数值方法解上述 airy 方程, 可得到  $E_{e^-}L$  关系, 如图 4 所示. 图中  $F$  是外加电场.

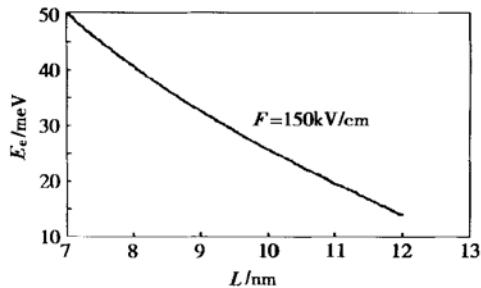


图 4 有外加电场时电子的基态能级随阱宽的变化

Fig. 4 Ground state energy of electron as a function of the exact well width in electric field

对波函数作归一化处理, 可求得一级微扰值. 由于我们对阱内不作微扰处理, 仅仅局限在势阱外, 因而微扰的值很小. 计算表明, 微扰值与基态本征能级相差几个数量级.

下面考虑与之对应的无限深势阱. 设它的阱宽为  $L_{\text{eff}}$ , 波函数满足

$$\varphi = p \text{Ai}(Z) + q \text{Bi}(Z) \quad (19)$$

$p, q$  为待定系数. 其能量本征值方程为

$$\text{Ai}(Z_+) \text{Bi}(Z_-) - \text{Ai}(Z_-) \text{Bi}(Z_+) = 0$$

$$Z \pm = -\left(\frac{2m^*}{(qF\hbar)^2}\right)^{1/3}(E \pm qFL/2) \quad (20)$$

其中  $\text{Ai}(Z)$  和  $\text{Bi}(Z)$  是 airy 函数. 得到  $L_{\text{eff}}L$  关系如图 5 所示.  $L_{\text{eff}}F$  关系如图 6 所示.

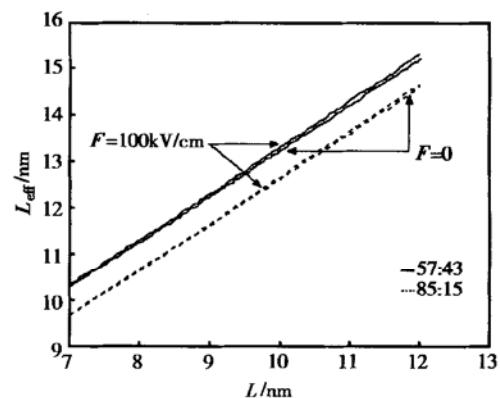


图 5 不同电场下等效宽度随阱宽的变化

Fig. 5 Effective width as a function of the exact well width in different electric fields

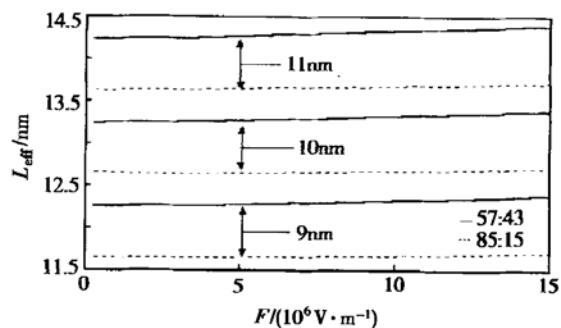


图 6 不同阱宽对应的等效宽度在电场下的变化

Fig. 6 Effective widths of different peer well width as a function of electric fields

由图 5.6 可知: 在电场下, 等效宽度与阱宽呈简单的线性关系; 虽然随着势阱宽度的增加, 等效宽度在电场的影响下, 偏差逐渐增大, 但在常用的宽度区间( $7 \sim 13$  nm), 在电场变化不是非常大的情况下( $F < 150$  kV/cm), 这种变化非常微小( $< 1\%$ ), 即  $L_{\text{eff}}$  对电场的变化并不敏感, 因而可用零电场下的等效宽度经验公式代替, 而不必考虑电场的影响. 只有当电

场足够大或者势阱足够宽时, 我们才需要考虑电场的影响。这种等效宽度对于电场的相对恒定性, 是由于同样强度的电场作用在宽度为  $L$  的有限深势阱上和作用在零电场下等效宽度为  $L_{\text{eff}}$  ( $L$  对应的等效宽度) 的无限深势阱时, 它们的基态能级变化极为接近(在外加电场增至  $100\text{kV/cm}$  时, 相差仍不足  $1\text{meV}$ ), 如图 7 所示。

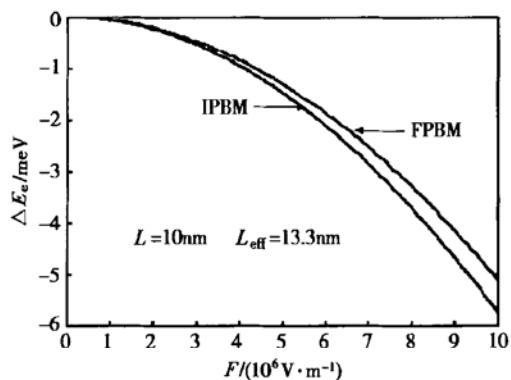


图 7 两种模型的电子基态能级差随电场的变化

Fig. 7 Changes of electron ground state energy as a function of electric field

在下面的部分, 我们还将从其它方面论证这一

点。但是由于  $L_{\text{eff}}$  对势垒高度的变化十分敏感, 表现在对不同的分裂比下, 曲线位置相差很大。为此, 工艺过程中, 如何精确控制 Al 的含量, 成为影响器件性能的极为重要的因素。

## 4 等效宽度法分析量子阱结构

### 4.1 波函数

先计算基态本征能级, 再用 airy 函数法分别得到有限深势阱和无限深势阱两种模型下的基态波函数。

图 8 给出了不同电场下, 不同阱宽的量子阱结构的波函数图像。

由图 8 可以看出: 在阱内, 不论是否有电场, 阵宽为  $L$  的有限深势阱和零场下等效宽度为  $L_{\text{eff}}$  的无限深势阱的波函数吻合得很好。以致图中几乎无法分辨; 而吻合的程度与阱宽相关: 阵宽越大, 吻合得效果越好, 即等效宽度的有效性越高; 而且有电场时的等效宽度与无电场时的等效宽度也几乎重合(见图 8 的竖线), 从而充分证明了我们取零场下的等效宽度的合理性。

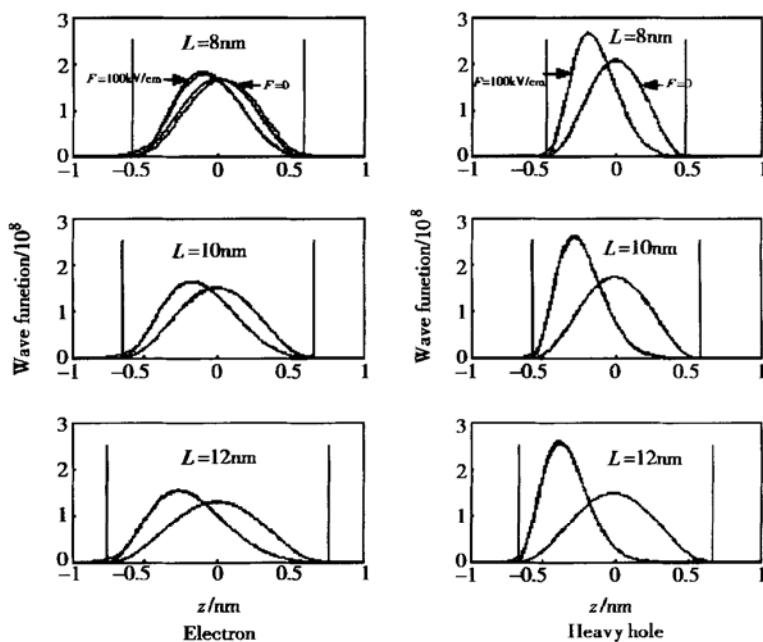


图 8 不同阱宽的量子阱中, 在不同的电场下, 用 FPBM 和 IPBM 分别得到的电子、空穴波函数分布比较

Fig. 8 Comparation of the wave functions of electrons and holes in quantum wells of different width in different electric fields, evaluated by IPBM and FPBM respectively

## 4.2 激子结合能

我们用变分法<sup>[11~13]</sup>来求解激子结合能, 采用下列的试探解<sup>[11, 14, 15]</sup>:

$$\Phi(r, Z_e, Z_h) = \varphi_e(Z_e) \varphi_h(Z_h) \varphi_{eh}(r) \quad (21)$$

$$\varphi_{eh} = (2/\pi)^{1/2} (1/\lambda) \exp(-r/\lambda) \quad (22)$$

$$r = |Z_e - Z_h| \quad (23)$$

其中  $\varphi_{eh}$  是二维激子的包络函数;  $\varphi_e(Z_e)$  和  $\varphi_h(Z_h)$  分别是电子和空穴的包络函数;  $Z_e$  和  $Z_h$  是电子、空穴相对于量子阱面的坐标;  $\lambda$  是变分参数.

激子结合能  $E_B$  由动能  $E_{KE}$  和势能  $E_{PE}$  组成:

$$E_B = E_{KE} + E_{PE} \quad (24)$$

$$\text{其中 } E_{KE} = \langle \varphi_{eh} \left| -\frac{\hbar^2}{2\mu} \times \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right| \varphi_{eh} \rangle = \hbar^2/(2\mu\lambda^2) \quad (25)$$

$$\begin{aligned} E_{PE} &= \langle \Phi \left| \frac{-e^2}{\epsilon(|Z_e - Z_h|^2 + r^2)^{1/2}} \right| \Phi \rangle \\ &= \frac{-e^2}{2\pi\epsilon\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dZ_e dZ_h |\varphi_e(Z_e)|^2 |\varphi_h(Z_h)|^2 G(r) \end{aligned} \quad (26)$$

$$G(r) = (2\pi/\lambda) \{ (\pi/2) [H_1(2r/\lambda) - N_1(2r/\lambda)] - 1 \} \quad (27)$$

其中  $\epsilon$  是介电常数;  $\mu$  是电子空穴对的约化质量;  $H_1$  是一阶 Struve 函数;  $N_1$  是一阶 Neumann 函数. 改变  $\lambda$  在得到最小的  $E_B$  时, 即可求得结合能. 图 9 列出了部分的  $E_B$ - $F$  关系.

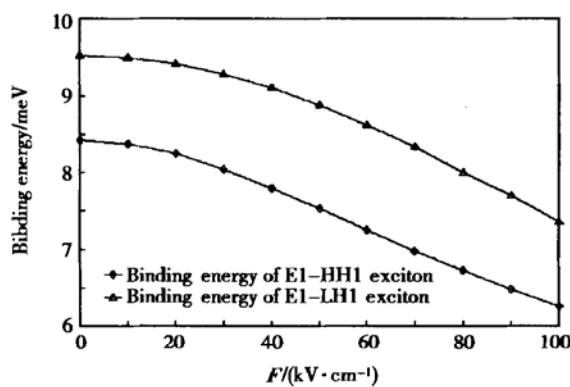


图 9 激子结合能随电场的变化

Fig. 9 Binding energy as a function of electric field

图 10 是利用等效宽度法得到的电子-重空穴激子结合能随阱宽的变化, 它与文献[11]的共振吸收法得到的结果吻合, 从而证明了  $L_{eff}$  的有效性.

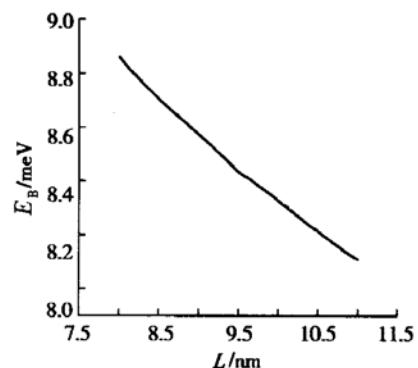


图 10 电子-重空穴激子结合能随阱宽的变化

Fig. 10 Binding energy of E1-HH1 as a function of well width

## 5 结论

在基态能级相同的条件下, 得到了有限深势阱的阱宽和无限深势阱的等效阱宽之间的关系, 并得出了两者之间的经验公式, 所得的结果和现有结论吻合得很好. 分析了电场对无限深势阱的等效宽度的影响及两种模型获得的波函数和激子结合能的情况, 结果证实了:(1)用等效宽度近似的无限深势阱模型代替有限深势阱模型是精确、有效的;(2)电场对无限深势阱模型中的等效宽度的影响极小, 所以用零场下的等效宽度来分析有外加电场的情形是合理而精确的.

## 参考文献

- [1] Tada K, Nishimura S, Ishikama T. Polarization independent optical waveguide intensity switch with parabolic quantum well. *Appl Phys Lett*, 1991, 59: 2778
- [2] Chuang S L, Ahn D. Optical transitions in a parabolic quantum well with an applied electric field analysis solutions. *J Appl Phys*, 1989, 65: 2829
- [3] Yamaguchi T, et al. Integrated Photonics Research' 94, FF6
- [4] Yamaguchi T, et al. Optical Fiber Communication' 94, TuC5
- [5] Feng H, Pang J P, Tada K, et al. Large field-induced refractive index change without red shift of absorption edge in five-step asymmetric coupled quantum wells with modified potential. *IEEE Photonics Technol Lett*, 1997, 9(5): 639
- [6] Feng Hao, Pang J P, Sugiyama M, et al. Field-induced optical effect in a five-step asymmetric coupled quantum well with modified potential. *IEEE J Quantum Electronics*, 1998, 34(7): 1197
- [7] Yamanaka K, Fukunaga T, Tsukada N, et al. Photocurrent spectroscopy in GaAs/AlGaAs multiple quantum wells under a high elec-

- tric field perpendicular to the heterointerface. *Appl Phys Lett*, 1996, 48: 840
- [ 8 ] Yu P W, Sanders G D, Reynolds D C, et al. Determination of transition energies and oscillator in  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  multiple quantum wells using photovoltaic induced photocurrent spectroscopy. *Phys Rev*, 1987, B35: 9250
- [ 9 ] Matsuura M, Kamizato T, et al. *Phys Rev*, 1986, B35: 8385
- [ 10 ] Sanders G D, Bajaj K K. Electronic properties and optical-absorption spectra of  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum wells in externally applied electric fields. *Phys Rev*, 1987, B35: 2308
- [ 11 ] Miller D A B, Chemla D S, Damen T C. Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures. *Phys Rev B*, 1985, B32: 1043
- [ 12 ] Yamaguchi T, Kato M, Tada K. A new variational method for calculating eigen energy in various quantum wells on the basis of effective well width. *IEEE Lasers and Electro-Optics Society*, 1994, 2: 293
- [ 13 ] Ishikawa T, et al. Observation of quantum confined Stark effect in a graded-gap quantum well. *Jpn J Appl Phys*, 1989, 28: 1982
- [ 14 ] Brum J A, Bastard G. Electric-field induced dissociated of excitons in semiconductor quantum wells. *Phys Rev*, 1985, B31: 3893
- [ 15 ] Steven P J, Whitehead M, Parry G, et al. Computer modeling of the electric field dependent absorption spectrum of multiple quantum well material. *IEEE J Quantum Electron*, 1988, 24: 2007

## Effective Well Width Analysis in Quantum Well Structures\*

Zhou Xiaoping, Zhou Jianying, Yang Ailing, Li Xihua, Jiang Xiaoqing and Wang Minghua

(*Department of Information Science & Electric Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China*)

**Abstract:** Under the effective mass approximation, some empirical formulas are obtained numerically concerning the correlations between the quantum well widths of finite potential barrier structure and those of infinite potential barrier structure under the circumstance that the ground state energies of two different models are equal in electric field, which match well with the results given by others. Then the wave functions and binding energies of excitons are analyzed, verifying the rationality to replace the effective width in electric field with that in zero field.

**Key words:** quantum well; effective width; binding energy;  $\text{GaAs}/\text{GaAlAs}$

**PACC:** 7320D

**Article ID:** 0253-4177(2002)07-0725-06

\* Project supported by National Natural Science Foundation of China(No. 69877017)