

# GaAs/AlGaAs 量子阱中的 $\Gamma$ - $X$ 混和 及谐振态和非限定态的研究

薛 舫 时

(南京电子器件研究所)

1988年9月22日收到

本文使用单带双谷理论研究了 GaAs/AlGaAs 量子阱中的  $\Gamma$ - $X$  混和现象。介绍了  $\Gamma$  态、 $X$  态和能级高于势垒的谐振态的特点。给出了谐振态能级随势阱和势垒层宽变化的关系。阐述了超薄层量子阱和非限定态的一些有趣的特性。在此基础上提出了一个超晶格能带的形成模型并对最新的一些实验结果给出了恰当的解释。

**主题词:** GaAs/AlGaAs 量子阱,  $\Gamma$ - $X$  混和, 谐振态, 非限定态, 超薄层量子阱, 超晶格能带模型, 单带双谷理论

## 一、引 言

GaAs/AlGaAs 量子阱具有良好的晶格匹配, 是目前研究得最为深入的一种量子阱。GaAs 的导带底在  $\Gamma$  点而 AlAs 的导带底在  $X$  点, 使得量子阱中经常产生  $\Gamma$  态和  $X$  态的混和。  $\Gamma$  态落在 GaAs 层内而  $X$  态却集中在 AlAs 层内形成  $k$  空间的状态同  $R$  空间中的包络函数对应起来的有趣特性。当量子阱的宽度变窄, 束缚能级升高时,  $\Gamma$  和  $X$  两态的比重将发生显著变化。随着两种状态的消长, 波函数在两层材料内的分布也就跟着改变, 从而导致第 I 类和第 II 类超晶格间的转变。

最近许多作者<sup>[1,2]</sup>用反射谱对 GaAs/AlAs 量子阱进行了研究, 在室温下就能观察到许多能级高于势垒的谐振态, 这些状态的波函数峰落在势垒层内, 具有不同于束缚态的特性。随着 MBE 和 MOCVD 工艺的不断改进, 人们已能制作单分子层厚的超晶格薄层。在此基础上许多作者<sup>[3,4,5]</sup>对超薄层 GaAs/AlAs 量子阱进行了实验研究, 得到了许多有趣的结果。有些现象有待于进一步的理论分析来解释。

有效质量包络函数是一种常用的理论模型。它认为波函数在  $k$  空间中是局域的, 因而能用带边的布洛赫函数来展开波函数, 运用  $R$  空间中的包络函数来描述量子阱中的状态。对于上述由直接/间接能隙材料构成的量子阱来说, 界面两侧材料的导带底分别位于不同的能谷中, 显然不能只考虑一个能谷的贡献。为此不少作者<sup>[6,7]</sup>使用能带方法来研究这一系统, 得到了许多有趣的结果。这种方法是用整个  $k$  空间中的布洛赫函数来展开波函数, 正如 Gell 等人所指出的, 描述一个状态要用到大量布洛赫函数, 显然是不够方便的。

作者在单带双谷理论中提出了一个计入双能谷的广义有效质量包络函数理论<sup>[1]</sup>。它计入了两个能谷的方程及其相互耦合,并且使用依赖于能量的有效质量来解决能带的非抛物线性。这一理论把有效质量理论和能带方法结合起来,用  $k$  空间和  $R$  空间的组合来描述量子阱中的状态。下面我们将用此理论来讨论 GaAs/AlAs 量子阱中的  $\Gamma$  态、 $X$  态、 $\Gamma$ - $X$  混和态、谐振态以及非限定态。

## 二、 $\Gamma$ 态、 $X$ 态和谐振态

考虑(100)方向的 GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  超晶格。为简单起见,本文所讨论的都是  $k_{\parallel} = q = 0$  的状态, $k_{\parallel}$  是指平行于异质结界面的波矢, $q$  是超晶格方向的超晶格波矢。GaAs 和 AlGaAs 层厚分别用  $W$  和  $B$  表示,以分子层为单位,这种结构可简写为  $(W, B)$ 。

表 1 中列出了  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  合金的  $\Gamma$ 、 $X$  谷能级  $E_{\Gamma}$  和  $E_X$  随组份比  $x$  的变化。当  $x=0$  时 GaAs 的  $E_{\Gamma}$  低于  $E_X$ ,是一直接带隙半导体。随着组份比  $x$  增大  $E_{\Gamma}$  迅速升高, $E_X$  则缓慢下降。当  $x > 0.4$  以后, $E_{\Gamma}$  高于  $E_X$ ,变成间接带隙半导体。

表 1  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  合金的  $\Gamma$ 、 $X$  谷能级  $E_{\Gamma}$  和  $E_X$

$x$	$E_{\Gamma}(\text{eV})$	$E_X(\text{eV})$
0	1.431	1.8998
0.2	1.6249	1.8595
0.4	1.8263	1.8189
0.5	1.9297	1.7985
0.8	2.2511	1.7369
1.0	2.4746	1.6954

图 1 中画出了 GaAs/AlGaAs 量子阱的电子波函数。横坐标是超晶格方向的距离,

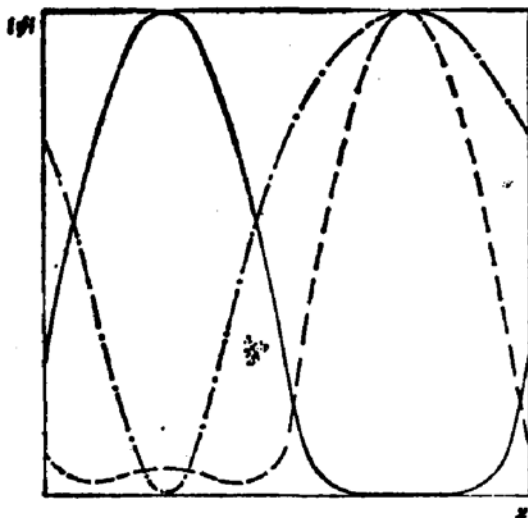


图 1 (30,30)结构的 GaAs/AlAs 和 GaAs/ $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  量子阱的波函数

左边是 GaAs 层,右边是 AlGaAs 层,层厚都是 30。因为波函数是复数,纵坐标画出了其绝对值。图中实线和虚线所画的是 GaAs/AlAs 阱。实线对应于  $E = 0.053\text{eV}$  的能级,它是一个  $\Gamma$  态,波函数峰落在左边 GaAs 层内。在右边 AlAs 层中仅留下一个衰减型尾巴。虚线所画的是  $E = 0.267\text{eV}$  的能级,它已高于  $X$  阱底,是一个  $X$  态,波函数峰落在 AlAs  $X$  阱内, GaAs 层成为它的势垒,仅留下一波函数尾巴。点划线所示的是 GaAs/ $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$  阱  $E = 0.22\text{eV}$  的波函数。由于组份比  $x$  降低,  $\Gamma$  势垒高度

减小,该能级已高于势垒而构成一个谐振态。这时在两层材料内电子能量都高于势能,不

存在衰减型波函数。在  $\Gamma$  阱中势能较低动能就相对地比较大,波函数的变化比较陡。在  $\Gamma$  势垒中势能较高,电子动能较小因而波函数比较平坦。结果波函数主峰就落在势垒层中。这一情形正同原子中较高能级的电子波函数落在外层轨道中一样。

对于束缚态来说,波函数全集中在势阱中,因而能级取决于势阱宽度。阱宽越小能级越高。而在谐振态中波函数分布于两层材料内,其能级的变化规律是一个值得研究的新问题。图 2 中画出了 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 量子阱的能级。由于势阱是对称的,能级分为对称和反对称两种,分别用实线和虚线来表示。图 2(a) 中势垒宽度被固定在 30, 能量较低的  $E_1^+$  能级是一个  $\Gamma$  能级,所以能级随阱宽  $W$  减小而升高。能级  $E_1^+$  在大  $W$  下也是一个  $\Gamma$  态,同  $E_1^+$  能级类似。在小  $W$  下  $\Gamma$  能级升高到 X 能级以上,所以在 31 附近该能级转化为 X 能级。X 能级不随势垒宽度  $W$  而变,使得  $E_1^+$  转为一条水平线。在图 2(b) 中  $W$  被固定为 30, 在  $E_1^+$ 、 $E_1^-$  等几条较高能级的曲线中同样可以发现能级随  $B$  减小而升高的部份,但是变化斜率要比图 2(a) 稍小一点。虽然波函数主峰落在势垒层中,但因波函数比较平坦,层厚变化对能级的影响也就小一些。图中的  $E_1^+$  是一个特殊的能级,其能量 0.2938eV 正好同  $\Gamma$  阱顶即势垒层中的势能相等。于是该区内的动能为零,波函数蜕化成一直线。不管势垒层多厚,能级都保持不变。因此在谐振态中势阱和势垒层厚的变化对其能级都有影响,有时还出现  $\Gamma$ -X 混和,情况要比束缚态更为复杂。

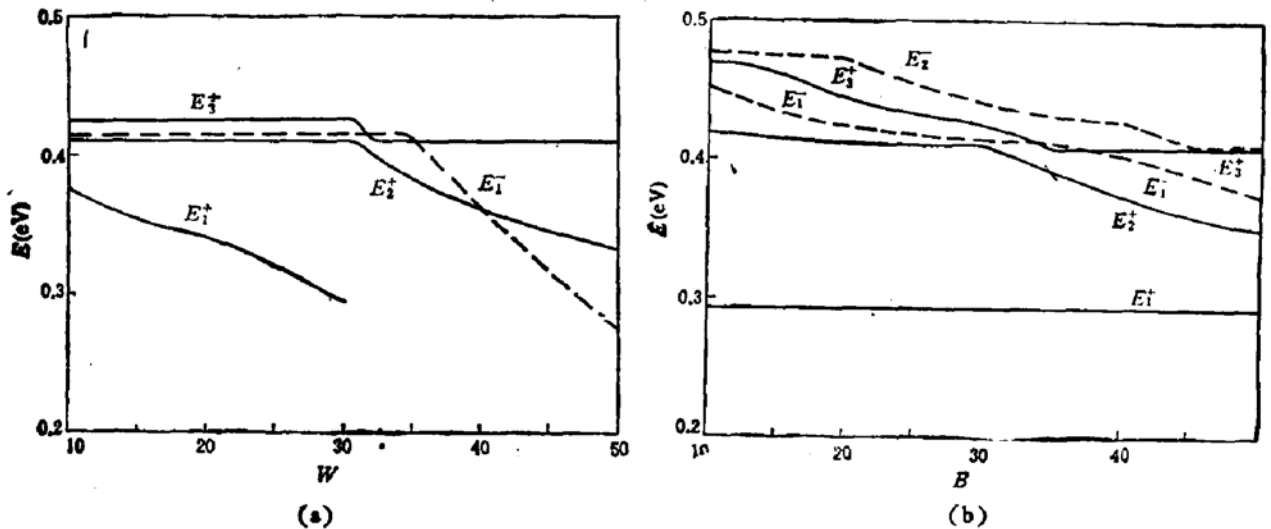


图 2 (a)  $B = 30$  的 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 量子阱的谐振能级同阱宽  $W$  间的关系 (b)  $W = 30$  的 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 量子阱谐振能级同势垒层宽  $B$  间的关系

### 三、超薄层量子阱和非限定态

随着 MBE 和 MOCVD 技术的不断完善,许多作者<sup>[3,4]</sup>进行了超薄层超晶格的研究。这些实验结果大致可以归结为:当层厚小于 15 时 PL 和 PLE 谱中出现一些新的特征,PL 谱峰移向高能端,谱线增宽,并且出现边峰。相应地 PLE 谱中重空穴和轻空穴峰的间距随层厚减小而减小,同时它们同 PL 峰间的能量差增大。当层厚小于 6 时 PLE 谱不再出现分裂谱线而呈现出一个阈值,能量高于阈值后谱线强度可以增大 3 个量级。与此同时 PL 峰同 PLE 阈能之间产生大于 100meV 的能量差。

这些实验现象可用上节所述的几种量子阱状态来解释。随着量子阱层厚减小,束缚能级不断升高,离阱顶的距离就缩短,使波函数在势垒层中有较强的渗透。这样势阱和势垒层中波函数的差别减小,逐渐向谐振态过渡,量子阱的限定作用减弱,形成一个弱限定态。这时超晶格子带就有较宽的带宽,因而在 PL 谱峰移向高能端的同时谱线增宽。

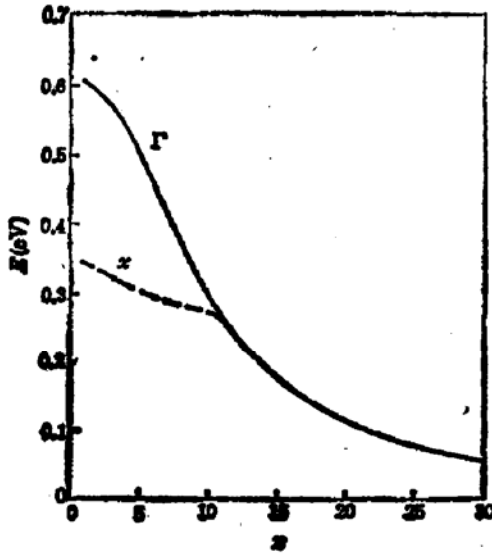


图3 ( $n, n$ ) GaAs/AlAs 量子阱的  $\Gamma$  (实线) 和 X (虚线) 态能级随层厚  $n$  变化的关系

实线所示的  $\Gamma$  能级就远高于虚线所示的 X 能级。从而使 X 态成为最低束缚态,超晶格就由第 I 类转变成第 II 类。 $n = 12$  可以看成为产生这一转变的转变厚度。在这种超薄层超晶格中,束缚态能级很高,量子阱的限定作用已很弱,子带扩展得很宽,态密度成为一个连续谱,因而就像一种导带底在 X 谷的间接带隙半导体,PL 谱中出现的阈能就是 X 谷的能量。在小  $n$  值下  $\Gamma$  和 X 能级之差约为 250meV,同江德生等人<sup>[3]</sup>从实验中求得的 PLE 峰与 PL 峰间的能量差  $\Delta E$  相近,说明他们所提出的模型是正确的。最近 Laruelle 等人<sup>[4]</sup>对 GaAs/Al<sub>0.25</sub>Ga<sub>0.75</sub>As 超薄层量子阱的实验测量表明,在 10 埃宽的量子阱中这一  $\Delta E$  只有 8meV。由于在低组份 X 势垒中,  $\Gamma$  阱顶很低, X 阱底又较高,没有  $\Gamma$ -X 态的混和,所以  $\Delta E$  值就很小,也是同上述模型相吻合的。

最近 Takahashi 等人<sup>[4]</sup>用 PL 和 PLE 谱研究了超薄层 GaAs/AlAs 超晶格,测得了和图 3 类似的结果。Gell 等人<sup>[5]</sup>研究 GaAs/AlAs 超晶格能隙时发现在  $n = 8$  附近出现  $\Gamma$ 、X 交叉。Nelson 等人<sup>[6]</sup>的赝势计算得出这种转变大约发生在 10~12 层的范围内,和本文结果相近。

重空穴和轻空穴的谱线间距也是一个有趣的问题。立方对称半导体的重空穴带和轻空穴带因对称性而在  $\Gamma$  点简并。在量子阱中生长方向的平移对称性遭到破坏而使重空穴和轻空穴基态束缚能级简并消除。图 4(a) 中画出了 ( $n, 150$ ) 结构的孤立量子阱的轻空穴和重空穴能级之差  $S = E_1 - E_2$ 。在大  $n$  下波函数全限定在阱内,接近于 GaAs 情形使  $S$  趋近于零。在  $n$  很小时,大部份波函数渗透入势垒层中。图 5(a) 中画出了 (2, 20) 结构 GaAs/AlAs 阱的波函数,虽然波峰落在虚线左侧的阱中,但虚线右侧仍渗透着大部份波函数。这类似于 AlGaAs 体材料,  $S$  也应趋于零。这样就在中间阱宽下  $S$  达到一个极大值。图中 A、B 曲线画出了 GaAs/AlAs 和 GaAs/Al<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>As 阱的  $S$  值,分别在  $n = 4$  和 8 下达最大值。这是因为前者势垒高把波函数压向阱内的缘故。在无限深的势阱中,

由于 X 谷的有效质量远大于  $\Gamma$  谷质量,因此当量子阱层厚减薄时  $\Gamma$  态能级的上升速率要比 X 态高得多。图 3 中画出了 ( $n, n$ ) 结构的 GaAs/AlAs 量子阱中  $\Gamma$  态和 X 态能级随层厚变化的关系。当层厚大于 12 时,量子阱中的最低束缚态是  $\Gamma$  态。层厚小于 12 时  $\Gamma$  能级已升高到 X 阱底以上,阱内出现了 X 态。由于  $\Gamma$  态能级上升速率快,在小阱宽下

由于  $\Gamma$  态能级上升速率快,在小阱宽下

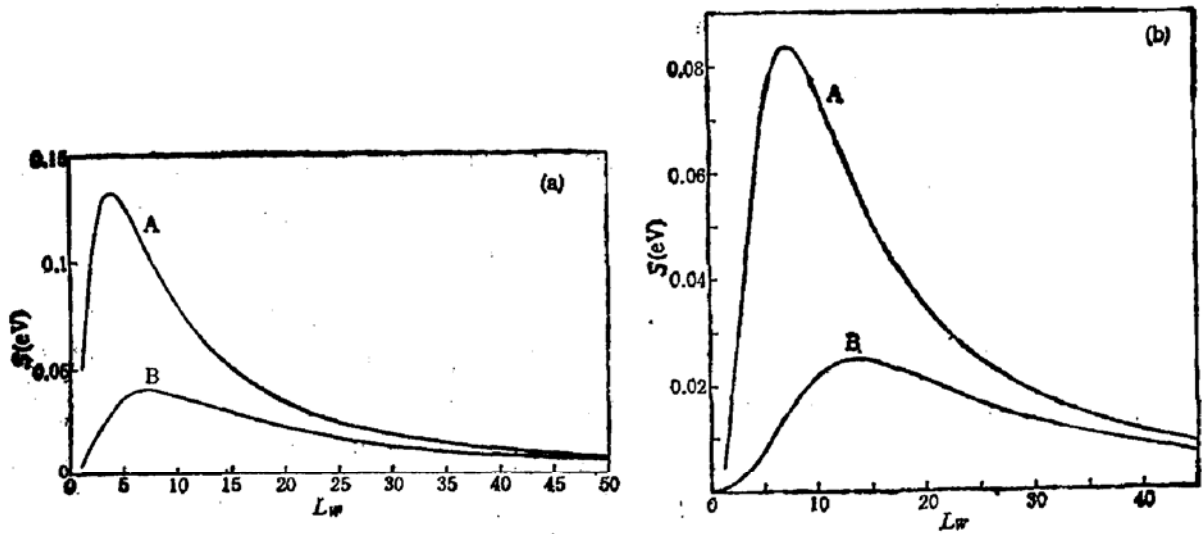


图4 (a)  $(n, 150)$  结构和 (b)  $(n, n)$  结构量子阱的重空穴和轻空穴能级差  $S$   
 曲线 A: GaAs/AlAs; B:  $^{13}\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$

电子全被限定在势阱内,因而阱宽越小  $S$  值应该越大。

图4(b)中画出了  $(n, n)$  结构量子阱的  $S$  值。曲线的变化趋势基本上同图4(a)相似,不过  $S$  峰移向较高的  $n$  值。A、B 两阱分别在  $n = 7$  和 14 处给出  $S$  的极值。在大  $n$  下波函数都限定在阱中,同孤立阱情形相似。图5(b)中画出了  $(2, 2)$  结构 GaAs/AlAs 阱的重空穴波函数。左右两侧波峰与波谷之比仅为 1.35, 分配比较均衡, 构成一个非限定态。它接近于布洛赫状态使  $S$  值趋于布洛赫态的 0。正是这一缘故使小  $n$  层下  $S$  值趋于零。

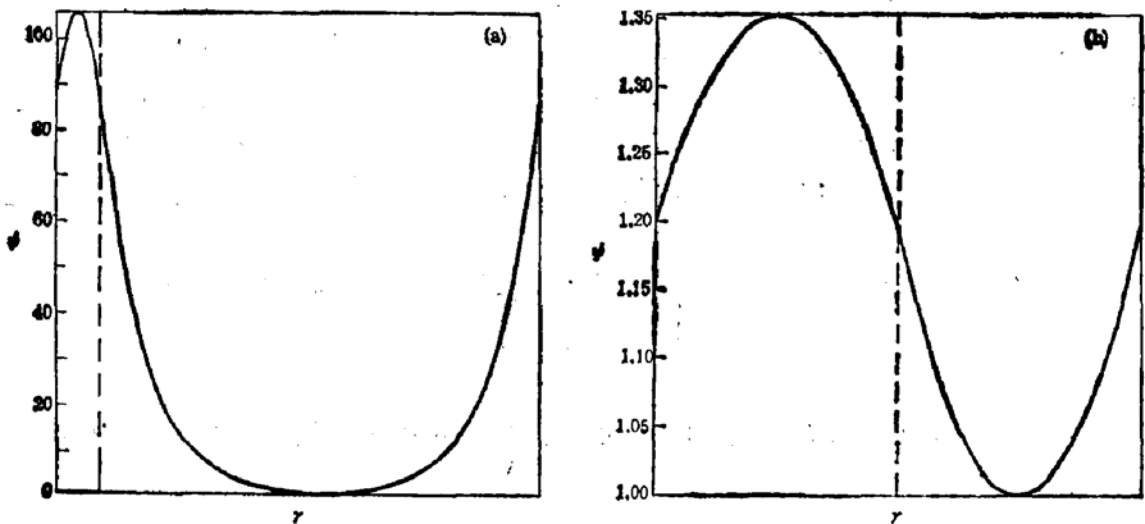


图5 (a)  $(2, 20)$  结构和 (b)  $(2, 2)$  结构的 GaAs/AlAs 量子阱中的重空穴波函数

这一结果同江德生等人<sup>[5]</sup>的实验是完全吻合的。随着势阱宽度的减小  $S$  值先增大经过一极大值后又减小,同时量子阱的限定作用减弱使谱线宽度增大。在  $n$  小于 6 以后由于  $S$  值小于谱线宽度而不再能分辨出这两条谱线来。

## 四、讨 论

由势阱层和势垒层构成的异质结量子阱破坏了体材料的周期性势场, 形成一些限定能级, 把波函数限定在局部区域内. 异质结界面的势垒高度一般在  $1\text{eV}$  左右, 和禁带宽度及深杂质束缚能有相同的量级. 因而它的束缚范围应该同杂质电子态相近. 当然它的二维界面给量子阱带来了许多二维系统的特性. 一般十几层到几十层分子层范围是形成量子阱束缚能级的典型结构. 电子状态可用  $R$  空间来描述, 人们常用“盒子中的粒子”模型来处理. 当能级高于势垒时, 反键谐振态的波函数峰落在势垒层中, “粒子”跑到了“盒子”外面去. 不但其波函数不同于束缚态, 能级同势垒和势阱层宽的关系也产生了新的变化. 当量子阱变得很薄时, 势垒不能产生完美的限定效应. 例如对几层分子层的阱其限定范围已同分子轨道相近, 而势垒却比分子势小得多. 这时波函数被挤到势垒层中, 从而产生弱限定态和非限定态. 对这类状态  $R$  空间的限定作用已很弱, 用  $k$  空间来描述就更为恰当. 超薄层 GaAs/AlAs 量子阱光谱类似于间接带隙半导体就是一很好的证明. 应该指出, 对超薄层超晶格来说, 在单带双谷理论中被忽略的一些衰减快的衰减解变得重要, 使用“大原胞”能带计算方法应该会得到更好的结果.

GaAs/AlAs 超晶格系统中的  $\Gamma$ - $X$  混和效应是一个值得研究的重要问题. Nelson 等人<sup>[20]</sup>用赝势法对此进行了有趣的讨论. 该系统的价带顶是由 As 阴离子构成的, 而导带底则取决于  $\Gamma$  和  $X$  两个能级的位置. 在厚层超晶格中最低能级是  $\Gamma$  能级, 由 Ga 阳离子形成导带底. 当层厚减薄使  $\Gamma$  能级高于  $X$  能级时, 导带底就从 Ga 阳离子转到了 Al 阳离子上. 正是这一转变过程决定了量子阱的许多光谱特性. 利用这一模型还能推测出超薄层超晶格能带随层厚的变化关系. 考虑由 A、B 两种材料来构成超晶格 C. 如 A 的导带底在  $\Gamma$ , B 的导带底在  $X$ , 前者能量低于后者, 则在大的层厚下 A 阱和 B 阱子带都接近各自的带边, 超晶格 C 的导带底应是 A 的  $\Gamma$  谷. 由于  $X$  谷有效质量总大于  $\Gamma$  谷,  $\Gamma$  能级将随层厚减薄而迅速上升. 在一定层厚下它超过 B 的  $X$  子带而使 B 的  $X$  谷成为 C 的导带底. 如果 B 的  $X$  谷能量低于 A 的  $\Gamma$  谷能量, 则层厚减薄时  $\Gamma$  能级迅速上升, C 的导带底总在 B 的  $X$  谷.

综上所述, 在这种直接/间接带隙量子阱中, 电子状态应由  $k$  空间和  $R$  空间的组合来描述, 单带双谷理论不失为一种有效的理论方法.

本文是作者在英国 GEC 公司 Hirst 研究中心工作时完成的. 作者对主人的热情接待深表感谢.

## 参 考 文 献

- [1] U. K. Reddy, G. Ji, T. Henderson, H. Morkoc and J. N. Schulman, *J. Appl. Phys.*, **62**, 145(1987).
- [2] H. Shen, S. H. Pao, Z. Hang and F. H. Pollak, *Solid State Commun.* **65**, 929(1988).
- [3] D. S. Jiang, K. Kelting, T. Izu, H. J. Queisser and K. Ploog, *J. Appl. Phys.*, **63**, 845(1988).
- [4] K. Takahashi, T. Hayakawa, T. Suyama, M. Kondo, S. Yamamoto and T. Hijikata, *J. Appl. Phys.*, **63**, 1729(1988).

- [5] F. Laruelle and B. Etienne, *Sol. Stat. Commun.*, **65** 565(1988).  
[6] M. A. Gell, D. Ninno, M. Jaros, D. J. Wolford, T. F. Keuch, and J. A. Bradley, *Phys. Rev.*, **B35**, 1196 (1987).  
[7] D. Z. -Y. Ting and Yia-Chung Chang, *Phys. Rev.*, **B36**, 4359(1987).  
[8] 薛舫时, 物理学报, 待发表.  
[9] M. A. Gell, M. Jaros and D. C. Herbert, *Superlattices and Microstructures*, **3**, 121(1987).  
[10] J. S. Nelson, C. Y. Fong and I. P. Batra, W. E. Fickett and B. M. Klein, *Phys. Rev.*, **B37**, 10203(1988).

## $\Gamma$ -X Mixing and Resonant States and Non-Confined States in GaAs/AlGaAs Quantum Wells

Xue Fangshi

(Nanjing Electronic Devices Institute)

### Abstract

The  $\Gamma$ -X mixing in GaAs/AlGaAs quantum wells is studied using the one band two valleys theory in this paper. We characterize the  $\Gamma$  states, X states and the resonant states with energies higher than the barrier. The dependence of the energy levels for these resonant states on the width of barrier and well is described. The interesting behavior for the superthin quantum wells and the non-confined states is explained. From these results, a formation model for the superlattice energy band is proposed and an appropriate explanation for some new experimental results is given.

**KEY WORDS:** GaAs/AlGaAs quantum wells,  $\Gamma$ -X mixing, Resonant states, Non-confined states, Superthin quantum wells, Superlattice energy band model, One band two valleys theory