

电场下多量子阱能级和光跃迁的计算*

秦 国 毅

张 志 勇

(南京大学物理系,南京,210008) (哈尔滨师范大学物理系,哈尔滨,150080)

1990年10月26日收到。1991年4月2日修改定稿

本文利用迫近递推法(ATM),用准静态近似,以较高的精度模拟实际的带边形状,自洽地计算了中等强度电场下,第I类 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 半导体多量子阱的载流子能级和波函数,并由此计算了多阱系光跃迁的吸收系数。结果表明,正如 Bleuse 等用紧束缚模型所预言的,电场导致了能级的等间距分布,载流子波函数的局域化以及对应于不同能级的波函数之间的平移关系。本文的方法可用于计算有复杂形状带边的半导体异质结构的载流子性质。

一、引言

研究电场对半导体多量子阱光学性质的影响,首先要精确定电场下多量子阱的能级结构和载流子的波函数。文献[1],[2],[3]和[4]用平直带边近似代替实际上的倾斜带边,影响了计算结果的精确度。本文用迫近递推方法^[5-7],以较高的精度模拟了实际的带边形状,自洽地计算了中等强度电场下 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 半导体多量子阱的能级结构和光跃迁。

二、计算方法

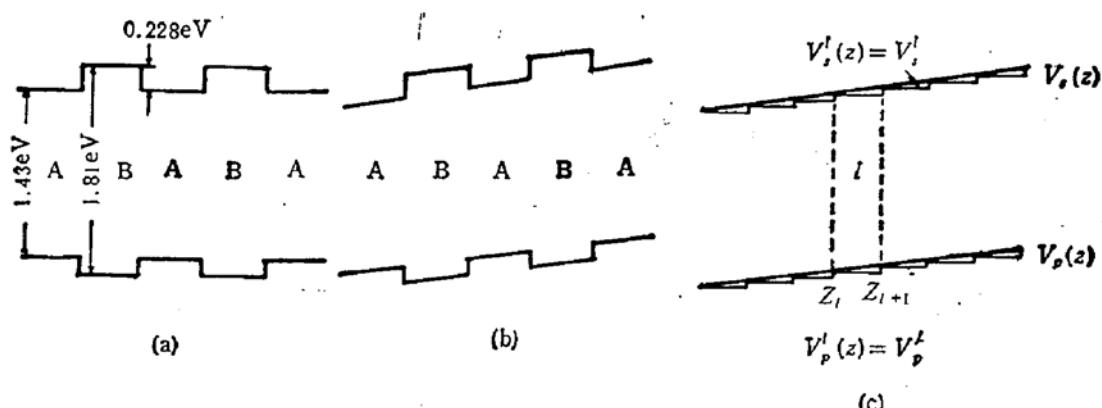
把整个系统按宽度分成 j 个微层,如果 j 足够大,每个微层的宽度很小。在一个微层内,譬如说第 i 个微层内,导带和价带边的能量 $V_i^d(z)$ 和 $V_i^v(z)$ 可近似视作常量 V_i^d 和 V_i^v 。于是整个系统的带边可近似表为一系列的阶梯,这些阶梯的包络正是带边的实际形状。经过这样的划分,具有复杂形状带边的系统可以近似地等价于一个多层次的平直带边系统,因而通过 j 个传输矩阵的逐次相乘可以确定系统的能级结构和载流子的波函数,经过多次迭代可以使结果达到相当的精度,这种方法称作迫近递推方法(ATM)^[6,9]。

三、计算结果

属于第I类的 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 多量子阱系统的带边结构如图1(a)所示。

图1(a)中A表示 GaAs 层,B表示 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 层。两者的禁带宽度分别为 $E_{\text{GaAs}}=1.43\text{eV}$ 和 $E_{\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}}=E_{\text{GaAs}}+(1.155x+0.37x^2)\text{eV}=1.81\text{eV}$;

* 国家自然科学基金资助项目。



(a) GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 多量子阱系统的带边结构图 (图中没有绘出系统左右两侧有限高但无限宽的 Ga_{1-x}Al_xAs 势垒) (b) 沿多量子阱生长轴方向施加恒定电场后的带边结构图 (c) 倾斜带边近似由一列平直台阶形带边模拟的示意图

图 1

且有 $V_p(z) = V_s(z) = 0$ 当 z 处于 A 层内;

$$\left. \begin{array}{l} V_s(z) = 0.228 \text{ eV} \\ V_p(z) = -0.152 \text{ eV} \end{array} \right\} \text{当 } z \text{ 处于 B 层内.}$$

为便于比较, 我们首先计算了零电场时六量子阱系统的电子和空穴能级和相应的波函数。六量子阱系统是由 6 个 GaAs 阵组成, 阵与阵之间由 Ga_{1-x}Al_xAs 势垒隔开, 而六阱系的左右两侧则是与有限高但无限宽的 Ga_{1-x}Al_xAs 势垒相邻接。

计算中我们取: Kane 矩阵元 $\pi = 1.109 \times 10^{-4} \text{ meV} \cdot \text{cm}$, $x = 0.3$, GaAs 层和 Ga_{1-x}Al_xAs 层的电子有效质量分别取为 $m_{\text{GaAs}}^e = 0.067m_0$, $m_{\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}}^e = 0.0919m_0$, 两者的重空穴有效质量分别取为 $m_{\text{GaAs}}^{h*} = 0.34m_0$, $m_{\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}}^{h*} = 0.573m_0$, 阵宽和垒宽都等于 $d = 35 \text{ \AA}$ 。

表 1 列出了六阱系统电子和重空穴的能级值。表中电子和空穴的能量零点分别取在 GaAs 层的导带底和价带顶。

从表 1 可见, 电子的前五个能级间隔在 6 至 9 meV 之间。重空穴的前五个能级间隔在 8 至 9 meV 之间。图 2 给出了与表 1 中基能级和第一激发能级相对应的电子波函数的

表 1 六阱系统的电子和重空穴能级(表中 n 是能级序数, 能量以 meV 为单位)

	n	能量值(meV)
电子能级	1	93.5515
	2	99.9392
	3	108.0566
	4	116.7094
	5	123.8232
重空穴能级	1	-10.8859
	2	-18.7846
	3	-27.6422
	4	-35.0120
	5	-44.9834

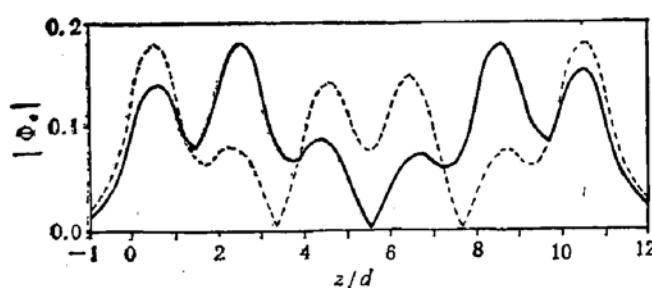


图2 零电场下六量子阱系统中电子基态波函数的模(实线)和第一激发态波函数的模(虚线). 图中横坐标 z/d 的零点取在六阱系最左面一个阱的左边界上

模. 显然电子波函数具有明显的扩展态的特征. 波函数的模对于结构中心是对称的.

如果沿多量子阱的生长轴方向施加恒定电场, 其强度为 F , 电场势 eFz 将使系统的导带和价带边发生倾斜如图1(b)所示. 此时在每个势阱(或势垒)区内, 带边值 $V'_1(z)$ 和 $V'_p(z)$ 都不是常量. 但是我们可以把每个阱区及垒区都化分成许多微层如图1(c)所示, 然后用 ATM 方法计算系统的能级和波函数. 在电场的作用下, 六阱系统左右两侧的无限宽 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 势垒的导带边和价带边也应是倾斜的, 但若电场不太强, 载流子以隧道效应穿出两侧势垒的几率极小, 能级基本上没有展宽, 因此可把两侧的无限宽势垒的带边近似为平直的, 称为准静态近似.

我们分别对电场强度 $F = 10 \text{ kV/cm}$, 20 kV/cm 和 30 kV/cm 等三种情形计算了六阱系统的电子能级和波函数, 表2列出了计算所得的电子能级值. 电子能量的零点取在如图1(b)所示的电场方向下系统左面第一个阱的左界面的导带边上.

表2 电场下六阱系统的电子能级

电场强度 F (kV/cm)	能级序数 n	能量值 E (meV)
10	1	98.9910
	2	110.6734
	3	119.9553
	4	128.4971
	5	138.0310
	6	150.7443
20	1	103.2728
	2	121.5682
	3	136.6285
	4	150.8247
	5	165.4144
	6	183.8175
30	1	130.7840
	2	152.2852
	3	173.3322
	4	194.5011

我们又对电场强度分别为 $F = 5 \text{ kV/cm}$ 和 10 kV/cm 等二种情况计算了六阱系统

表 3 电场下六阱系统的重空穴能级

电场强度 F (kV/cm)	能级序数 n	能量值 E (meV)
5	1	-8.1172
	2	-16.4715
	3	-25.2321
	4	-33.1792
	5	-36.3445
10	1	-6.3444
	2	-11.0034
	3	-15.5578
	4	-22.5827
	5	-29.7573

的重空穴能级和波函数，表 3 列出了计算所得的重空穴能级。空穴能量的零点取在最右面一个阱右界面的价带边上。

计算结果表明，当电场低于 30kV/cm 时，电子能级间隔是不等间距的，但当电场等于或超过 30kV/cm 时，电子能级趋向等间距分布，因为这时 $2dFe$ 的值已接近有相同结构参数的 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 超晶格的电子基子带的带宽。

图 3 给出了 $F = 30\text{kV/cm}$ 时能量最低的四个能级所对应的电子波函数的模。可以看出，与零电场情形相比较，波函数呈现明显的局域化。与不同能级相对应的波函数的模的形状基本相同，能量每升高一级（从较低能级升高到邻近的能级），电子波函数的模的形状基本不变但整体沿电场方向平移，平移距离大致等于 $2d$ 。

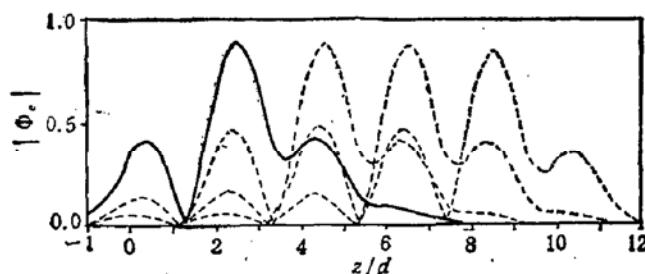


图 3 电场强度 $F = 30\text{kV/cm}$ 时，六量子阱系统的电子波函数的模，图中实线为基态波函数的模，虚线分别为第一、第二和第三激发态波函数的模

对于重空穴，当电场强度 $F = 5\text{kV/cm}$ 时，能级尚未出现等间距分布，但当电场增加到 10kV/cm 时，重空穴 $n = 2$ 以上的能级间距就趋向均等，间距值大致等于 $2dFe = 7\text{meV}$ 。重空穴波函数也由此呈现局域化，而且随重空穴能级每升高一级，重空穴波函数的模沿着电场相反方向作整体移动，移动距离也大致等于 $2d$ 。以上所述的计算结果与文献[1]的计算结果和讨论定性上完全一致。

四、自洽计算和光跃迁

外电场的存在使电子和空穴呈局域化的分布，因而产生附加的自洽势。对于本征的

多量子阱，在电量子极限下，电子面密度和空穴面密度相等，自洽势可由泊松方程确定：

$$d^2V_H(z)/dz^2 = (-4\pi e^2 N_s / \epsilon_s) [|\Psi_e^0(z)|^2 - |\Psi_h^0(z)|^2], \quad (1)$$

式中 N_s 是电子或空穴的面密度， $\Psi_e^0(z)$ 和 $\Psi_h^0(z)$ 分别是电子和重空穴的基本波函数， ϵ_s 是系统的介电常数。求解方程(1)可得电子和重空穴的自洽势：

$$V_H^e(z) = -4\pi e^2 N_s / \epsilon_s \int_{z_0}^z dz' \int_{z_0}^{z'} dz [|\Psi_e^0(z)|^2 - |\Psi_h^0(z)|^2] \quad (2)$$

$$V_H^h(z) = -V_H^e(z)$$

式中积分下限 z_0 取在横坐标 z/d 的零点。

电子和重空穴的总势能为：

$$\begin{aligned} V_{i,c}(z) &= V_i(z) + V_H^e(z) \\ V_{p,c}(z) &= V_p(z) + V_H^h(z) \end{aligned} \quad (3)$$

在原先划分的每个微层内， $V_{i,c}(z)$ 和 $V_{p,c}(z)$ 可近似视作常量，用它们取代原先的 $V_i(z)$ 和 $V_p(z)$ 并重复前述的全部计算，可以得到能级和波函数的较精确值，反复迭代直至自洽。表 4 列出了电场 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 情形，六阱系统重空穴能级的逐次迭代结果。

表 4 电场强度 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 时，六阱系统重空穴能级的自洽计算结果

	能级序数 n	迭代次数 k	能量值 E
重 空 穴 能 级	1	0	-6.3444
		1	-6.2675
		2	-6.2400
		3	-6.2263
	2	0	-11.0034
		1	-10.9319
		2	-10.9064
		3	-10.8937
	3	0	-15.5578
		1	-15.4979
		2	-15.4765
		3	-15.4658
	4	0	-22.5827
		1	-22.5449
		2	-22.5314
		3	-22.5246
	5	0	-29.7573
		1	-29.7388
		2	-29.7322
		3	-29.7289

图 4 给出了电场强度 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 情形下，重空穴波函数的模的自洽计算结果。

以上自洽计算得到的是电场下多量子阱的较精确的波函数，故可用于计算电场下的

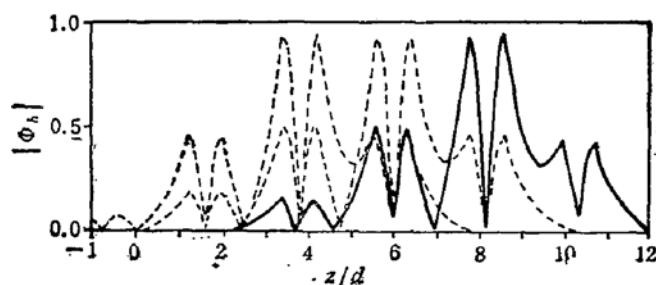


图 4 电场强度 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 时, 六量子阱系统的重空穴波函数的模的自治计算结果。图中实线为第二激发态波函数, 虚线为第三、第四激发态波函数

光学跃迁矩阵元和光吸收系数。

多量子阱第 n 个电子能级(对应的本征态为 $|\Psi_{en}\rangle$)与第 n' 个重空穴能级(对应的本征态为 $|\Psi_{hn'}\rangle$)之间的跃迁矩阵元为^[8]

$$P_{nn'} = \langle \Psi_{en} | P_z | \Psi_{hn'} \rangle = P \langle \phi_{en} | \phi_{hn'} \rangle \quad (4)$$

式中 $P = \langle s | r_z | z \rangle$, $\langle \phi_{en} | \phi_{hn'} \rangle$ 为 z 方向电子和重空穴包络函数的交叠积分, 光学矩阵元平方 $Q_{nn'} = \frac{2}{m_0} |P_{nn'}|^2$, 光吸收系数为

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{1}{\omega} \sum_{k_e} \sum_{nn'} |P_{nn'}|^2 \delta[E_{n'} - E_n - \hbar\omega] \quad (5)$$

本文计算了电场强度 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 时六阱系统的光学跃迁性质, 这时重空穴能级已形成等间距的 Wannier-Stark 梯级, 但电子能级尚未完全转化为等间距的 Wannier-Stark 梯级, 也就是重空穴波函数已形成明显的局域化型式, 但电子波函数则尚未完全局域化。我们把这种情形作为一个例子来计算光吸收系数。电场更高时, 光吸收系数的计

表 5 电场强度 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 时, 六阱系统的光学矩阵元平方值(以 eV 为单位)

$n \backslash n'$	CB1	CB2	CB3	CB4	CB5	CB6
HH1	0.024	2.643	8.437	7.290	8.078	7.885
HH2	0.262	10.608	25.478	18.909	23.289	24.794
HH3	6.114	3.868	0.580	0.497	1.154	0.336

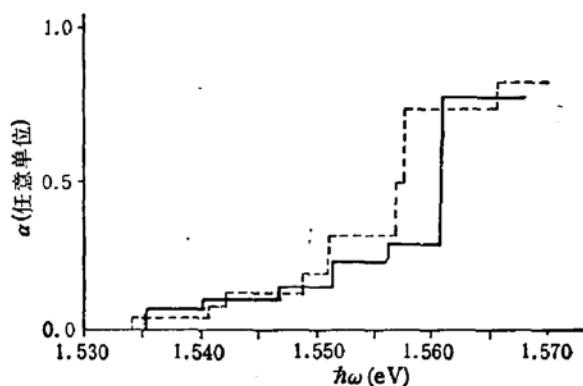


图 5 六量子阱系统光吸收系数与光子能量的关系图, 图中实线是电场强度 $F = 10 \text{ kV/cm}$ 时的结果, 虚线是零电场下的结果

算方法完全相同。表5列出了电场强度 $F = 10\text{ kV/cm}$ 下六阱系统的光学矩阵元平方的值。

表5所列的值在数量级上与文献[8]和[9]的结果相符。

图5给出了零电场和 $F = 10\text{ kV/cm}$ 情形，六阱系统的光吸收系数与光子能量的关系。可以看到，施加电场后，吸收边有一个兰移，这与 J. Bleuse 和 G. Bastard^[1]的在较强电场情形的计算结果是一致的。在 $F = 10\text{ kV/cm}$ 时，跃迁 HH1-CB1, HH2-CB2 和 HH3-CB3 的跃迁能量分别为 1.5352, 1.5516 和 1.5654eV。相应的六个吸收峰值对应于 $(1,1), (1,2), (2,1), (2,2), (1,3)$ 和 $(2,3)$ 跃迁。其中 (n_v, n_c) 代表价带和导带标号。

五、讨 论

J. Bleuse 等用数值计算法求解多量子阱系统的有效质量方程^[1]来检验紧束缚近似法的正确程度。与他们的结果相比，ATM 方法有以下的优点：1. 前者假定电场是分段光滑的因而带边是平直的，我们则考虑了由外电场造成的带边的倾斜。阱宽和垒宽越大，这两种方法所得结果的差距越大。2. 前者不能自洽求解，而后者容易实现自洽。3. 后者可以同时计及导价带带边的变化及它们之间的相互影响，因此可适用于处理第 II 类的半导体多量子阱系统^[7]。

本文的一个重要目的是说明 ATM 方法是讨论半导体异质结构系束缚态的一个简易和快速的方法，可在小计算机上快速完成上述的计算。当电场强度较大因此载流子以隧道效应从系统一侧隧穿的几率较大时，本方法仍然适用，这时可同时计及系统两侧有限高但半无限宽势垒区中带边的倾斜，把这种系统看作是一个自由态系统，然后由久期方程的实部等于零来求出能谱而由其虚部等于零来确定能级的展宽^[10]。

参 考 文 献

- [1] J. Bleuse, G. Bastard and P. Voisin, *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 220 (1988).
- [2] D. A. B. Miller and D. S. Chemla, *Phys. Rev.*, **B33**, 6976 (1986).
- [3] P. W. A. McIlroy, *J. Appl. Phys.*, **59**, 3532 (1986).
- [4] B. Jogai and K. L. Wang, *Phys. Rev.*, **B35**, 653 (1987).
- [5] 秦国毅,物理学报,38,366(1989).
- [6] Guoyi Qin, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **1**, 7335 (1989).
- [7] Guoyi Qin, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **2**, 5723 (1990).
- [8] 夏建白,半导体学报,11,575(1987).
- [9] 夏建白,黄昆,物理学报,37,1(1988).
- [10] Peter J. Price, *Phys. Rev.*, **B38**, 1994 (1988).

Calculations on Subbands and Optical Transitions of Semiconductor Multiple Quantum Wells in Electric Field

Qin Guoyi

(Department of Physics, Nanjing University)

Zhang Zhiyong

(Department of Physics, Harbin Normal University)

Abstract

By using the asymptotic transfer method (ATM) in the quasistationary state approximation, the energy levels and wave functions of carriers in a moderate electric field are calculated self-consistently for type-I GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As semiconductor multiple quantum wells. On this basis, the optical absorption coefficient is calculated and analysed. As predicted by J. Bleuse et al., our results show that the electric field causes the energy level evenly spaced, the wave functions localized and the displacement relation between the wave functions corresponding to different energy levels. The method used here is universal and can be used to deal with the properties of semiconductor heterostructures in which there is complex potential profile.