

文章编号: 1001-4322(2007)08-1385-05

引入反比相关双曲余弦平方势描述 超晶格量子阱的电子跃迁*

罗晓华¹, 邵明珠²

(1. 重庆大学 电气工程学院, 重庆 400044; 2. 东莞理工学院, 广东 东莞 523106)

摘 要: 鉴于“方形”势阱过于简单和理想, 引入了反比相关双曲余弦平方势描述超晶格量子阱中的电子运动行为。在量子力学框架内, 把电子的 Schrödinger 方程化为了超几何方程, 并以 $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ 量子阱为例计算了电子的带内跃迁和带间跃迁。结果表明, 能级数目和跃迁能量与阱深、阱宽等系统参数有关, 只需适当调节这些参数就可望实现对超晶格量子阱光电特征的调节与控制。

关键词: 超晶格; 量子阱; 双曲余弦平方势; 电子跃迁; 超几何方程; 单粒子能级

中图分类号: O471.5; O571.33

文献标识码: A

从 20 世纪中后期开始, 超晶格和量子阱就一直一直是半导体物理学最活跃的前沿领域之一^[1-7]。所谓超晶格就是将两种晶格常数(略微)不同的材料交替生长而形成的多层薄膜结构。随着薄膜技术的发展, 人们已经可以根据需要人为地改变半导体材料的能隙特征, 制造出与均匀半导体材料性能不同的量子阱和超晶格, 这就是所谓能带(或能隙)工程。事实上, 只需控制材料的厚度就可以调整阱宽, 控制组分就可以调整阱深, 从而改变材料的光电性质。

当多量子阱或超晶格势垒层足够厚, 以致于量子阱之间的相互作用可以忽略时, 我们就可以把超晶格视为单量子阱的周期重复, 超晶格的整体行为就可视为单量子阱的线性叠加, 而多量子阱问题就简化为单量子阱问题。人们讨论得最多的量子阱是一个理想的“方形”势阱, 并从这种势阱出发计算了电子能级和波函数, 定性描述了超晶格的光电特征。与大块材料不同的是, 在讨论量子阱的光学性质时, 既要考虑带内跃迁, 也要考虑粒子带间跃迁。而相应的跃迁强度、选择定则等都由超晶格的能带结构决定。

鉴于“方形”势阱过于简单和理想, 我们引入反比相关的双曲余弦平方势来描述量子阱的粒子运动行为。本文在量子力学框架内, 利用反比相关双曲余弦平方势把粒子的 Schrödinger 方程化为超几何方程, 用系统参数和超几何函数严格地求解了粒子的本征值和本征函数, 并以 $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ 量子阱为例, 计算了粒子的带内跃迁和带间跃迁。结果表明, 系统的能级数目和电子的跃迁能量与阱深、阱宽等参数有关, 只需适当调节这些参数就可望实现对超晶格量子阱光电特征的调节与控制。

1 反比相关的双曲余弦平方势与系统的 Schrödinger 方程

对于“方形”势阱, 可用 Kronig-Penney 方法来描述。“方形”势阱的优点是形象、直观、概念明确、计算简单, 而它的缺点也恰恰是过于简单、粗糙。图 1 给出了理想情况下超晶格的能带结构。我们假设势垒层足够厚, 导带(或价带)的量子阱与量子阱之间的相互作用可以忽略, 于是超晶格的整体行为就可简化为单量子阱问题。

为了简单化而不失一般性, 我们考虑了两种材料 $GaAlAs$ 和 $GaAs$ 交替生长而成的半导体薄膜。由此得到的夹层结构 $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ 就组成了典型的单量子阱。粒子在势阱中的运动行为常用“方形”势来描述。“方形”势的特点之一是在势阱的界面处势能不连续, 但是有限; 势阱深度与两种材料的能隙宽度有关, 对于导带, 电子的势阱深度可表示为

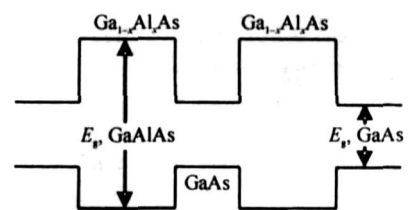


Fig. 1 Superlattice quantum well composed by $Ga_{1-x}Al_xAs$ and $GaAs$ in an ideal case
图 1 理想情况下, 由 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 和 $GaAs$ 交替生长而形成的超晶格量子阱

* 收稿日期: 2006-12-04; 修订日期: 2007-07-12

基金项目: 国家 863 计划项目资助课题

作者简介: 罗晓华(1969—), 男, 重庆人, 汉族, 在读博士, 研究方向为半导体材料的光电性质。

联系作者: 邵明珠, bgshaomz@dgut.edu.cn; bgluoshy@dgut.edu.cn。

$$V_{c0} = Q E_g \tag{1}$$

对于价带,空穴的势阱深度可表示为

$$V_{h0} = (1 - Q) E_g \tag{2}$$

式中: $E_g = E_{g,CaAlAs} - E_{g,CaAs}$, 其中, $E_{g,CaAlAs}$, $E_{g,CaAs}$ 是 GaAlAs 和 GaAs 的能隙宽度; Q 是电子和空穴势阱深度的分配系数, 它的取值范围一般在 0.65 ~ 0.70 之间。方形势阱的另一个特点是, 在量子力学框架内处理简单, 概念明确、直观。但是, 正是由于它的简单化和理想化, 只能定性描述量子阱的光电特征。我们引入反比相关的双曲余弦平方势来代替“方形”势阱, 用它来描述电子阱和空穴阱。反比相关双曲余弦平方势可具体表示为

$$V(x) = -V_0 \text{ch}^{-2}(x/a) \tag{3}$$

式中: x 与超晶格薄层垂直, 且坐标原点位于势阱中心的顶部; V_0 是势阱深度, $2a$ 是势阱宽度。图 2 将反比相关双曲余弦平方势与“方形”势进行了比较, 同时也示意性地给出了量子阱的带内跃迁和带间跃迁, 图的上部给出了电子势阱, 下部给出了空穴势阱。

粒子在势阱中的运动行为可以用 Schrödinger 方程描写。将相互作用势式(3)代入 Schrödinger 方程, 可得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu^\pm} \frac{d^2}{dx^2} - [E + \frac{V_0}{\text{ch}^2(x/a)}] = 0 \tag{4}$$

式中: E 是粒子能量; μ 是粒子有效质量, 电子的有效质量用 μ^- 表示; 空穴的有效质量用 μ^+ 表示。方程(2)是一个变系数二阶常微分方程, 形式上很复杂, 但是, 只要找到适当的变换, 就可以把它化为标准的超几何方程。相应的本征值和本征函数都可以用系统的参数和超几何函数严格地表示。下面, 就寻找一种变换把方程(4)化为标准的超几何方程, 并求出它的本征值和本征函数。

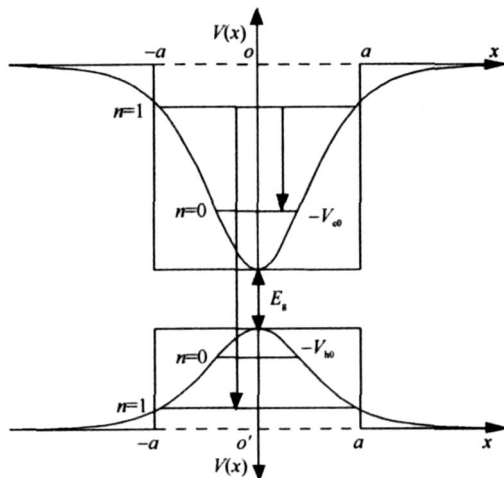


Fig. 2 $\text{Ch}^{-2}x$ potential and a single electron energy level of superlattice quantum well
图 2 反比相关的双曲余弦平方势与量子阱的单粒子能级

2 系统的本征值和本征函数

通过试探, 找到如下变换^[8-9]

$$u = \text{ch}(x/a)^{-2} u, \quad = \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - 1 \right) \tag{5}$$

将这个变换带入方程(4), 可得 u 所满足的方程

$$\frac{d^2 u}{dz^2} - \frac{4}{a} \text{th} \frac{x}{a} \frac{du}{dz} + \frac{4}{a^2} (\dots) u = 0 \tag{6}$$

式中 $\dots = \sqrt{-\mu E a^2 / 2 \hbar^2}$ 。我们只讨论系统的分立谱, 即 $E < 0$ 的情形。

引入新的独立变量

$$z = -\text{sh}^2(x/a) \tag{7}$$

则关于 u 的方程(6)可化为 z 的超几何方程

$$z(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + [\frac{1}{2} - (1-2)z] \frac{du}{dz} - (\dots) u = 0 \tag{8}$$

将式(8)同超几何方程的一般形式

$$z(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + [\dots - (\dots + 1)z] \frac{du}{dz} - \dots u = 0 \tag{9}$$

相比较, 可以发现 $\dots = 1/2$, $\dots = \dots$, $\dots = \dots$ 。

从超几何方程理论可知, 方程(8)有两个解, 其中一个为偶函数解, 即

$$u_1 = F(\dots, \dots, 1/2; z) \tag{10}$$

另一个是奇函数解

$$u_2 = \sqrt{z} F(\dots, \dots + 1/2, \dots + 1/2, 3/2; z) \tag{11}$$

这些解给出波函数在 $x=0(z=0)$ 处的值是有限的,而 $F(-\frac{1}{2} - x, -x, 1/2; z)$ 和 $F(-\frac{1}{2} + 1/2, -x - 1/2, 1/2, 3/2; z)$ 就是超几何函数。

为了使波函数

$$u = (\text{ch } \frac{x}{a})^{-2} u \tag{12}$$

在 $x \rightarrow \pm (\infty)$ 时趋于零,方程(10)和(11)中的超几何函数应截断为多项式。例如,对 u_1 来说,这就意味着 $-x$ 或者 $-x - 1/2$ 都必须是一个非负整数。而第二种情况则应当舍去,因为,当 $x \rightarrow \pm \infty$ 时,波函数呈指数增加。由此,可求得

$$-x - 1/2 = k, \quad k = 0, 1, 2, \tag{13}$$

因而能级可以表示为

$$E_k = -\frac{2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{2} + 1} - 2k - \frac{1}{2} \right]^2 \tag{14}$$

与此类似,对于式(11),我们发现,当

$$-x - 1/2 = l, \quad l = 0, 1, 2, \tag{15}$$

则波函数在 $x \rightarrow \pm \infty$ 时是有限的,因而

$$E_l = -\frac{2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{2} + 1} - (2l + 1) - \frac{1}{2} \right]^2 \tag{16}$$

将式(14)和(16)合并,将它们统一表示为

$$E_n = -\frac{2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{2} + 1} - (n + \frac{1}{2}) \right]^2, \quad n = 0, 1, 2, \tag{17}$$

式(17)给出了系统的本征值,而式(3)、(10)和(11)则给出了系统的本征函数。

3 结果和讨论

3.1 能级数目

量子阱中分立能级的数目由不等式

$$N > \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{2} + 1} - \frac{1}{2} \tag{18}$$

给出。(9)式表明,势阱中的能级数目与势阱深度、宽度以及粒子的有效质量等参数有关。只需控制材料 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的组分分数 x 就可以控制阱深,控制材料 GaAs 的层厚就可以控制阱宽,进而就可以控制阱内的能级数目。从形式上看,式(18)中的 N 可以取很多值,实际上,它只能取几个分裂值。对于电子阱,选择电子的有效质量 $\mu^* = 0.067 m_0$ (m_0 是自由电子质量),势阱宽度 $2a = 10 \text{ nm}$ 时,不同阱深情况下量子阱中的能级数目见表 1。从表 1 可以看出,当参数 $V_{c0} = 0.20 \text{ eV}$ 时,阱内只有两条能级,相应的跃迁能量为 0.11 eV 。从表 1 还可以看出,对于 $V_{c0} = 0.10 \text{ eV}$ 情况,阱内只有一条能级,因此无带内跃迁。但进一步分析表明,这种情况下将发生带间跃迁(即超晶格量子阱的导带与价带之间的跃迁)。对于空穴也有类似结果。

表 1 阱宽 $2a = 10 \text{ nm}$,有效质量 $\mu^* = 0.067 m_0$ 情况下,不同阱深的能级数目与带内跃迁能量

Table 1 Energy level number and transition energy inside band for an electron with well width being 10 nm and effective mass of an electron $0.067 m_0$

N	V_{h0}/eV	E_0/eV	N	V_{h0}/eV	E_0/eV
1	0.10	0	4	0.50	0.18
2	0.20	0.11	5	0.60	0.20
3	0.30	0.14	5	0.70	0.22
4	0.40	0.16	5	0.80	0.24

3.2 跃迁能量

3.2.1 带内跃迁

粒子在任意两条能级之间的跃迁就是系统的辐射能量,将式(17)进行差(微)分可得

$$E_n = \frac{2}{\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{2} + 1} - (n + \frac{1}{2}) \right] \quad n, \quad n = 0, 1, 2, \tag{19}$$

形式上 n 可以取任意值,实际上,对于带内跃迁,选择定则决定了只有相邻能级(即 $n = 1$)之间的跃迁才是允许的(或几率最大)。当 $n = 1$ 时,式(19)化为

$$E_n = \frac{2}{\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{2} + 1} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right], \quad n = 0, 1, 2, \quad (20)$$

(20)式表明,随着 n 的增加,相邻能级之间的距离越来越小,直至连续,这正是有限深势阱所具有的能级特征。但是,对于量子阱却只有少数几条能级。当 $n=0$ 时,式(20)给出了第二条能级向基态能级的跃迁能量

$$E_0 = \frac{2}{\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{2} + 1} - \frac{1}{2} \right] \quad (21)$$

高位态相邻能级之间跃迁对辐射谱的贡献仅在低能一侧使谱线展宽。不同阱深情况下,由公式(21)求得的电子带内跃迁能量见表 1。

3.2.2 带间跃迁

从表 1 可以看出,对于 $V_{c0} = 0.10$ eV 情况,阱内只有一条能级,因此无带内跃迁。进一步分析表明,这种情况下将发生带间跃迁。对于空穴,当势阱深度 $V_{h0} = 0.04 \sim 0.07$ eV 时,阱内也只有一条能级,无带内跃迁。事实上,根据选择定则,电子从导带内 $n=0$ 能级跃迁到价带内 $n=0$ 的能级是允许的,跃迁能量由公式

$$E_{ch} = E_c + E_h + E_g \quad (22)$$

给出,其中 E_c, E_h 由式(17)给出。只需注意对于电子,式(17)中的有效质量 μ 为 μ^- ,势阱深度 V_0 为 V_{c0} ;对于空穴, μ 为 μ^+ , V_0 为 V_{h0} 即可。

选择电子的有效质量 $\mu^- = 0.067 m_0$,空穴的有效质量 $\mu^+ = 0.080 m_0$ (m_0 是自由粒子质量),势阱宽度 $2a = 10$ nm, $Q = 0.68$,并且有 $E_{g, GaAs} = 1.53$ eV,表 2 给出了不同能隙情况下,电子和空穴的阱深、能级数目和 0-0 带间跃迁能量。从表 2 可以看出,对于不同的 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 能隙,电子和空穴均有不同的势阱深度、能级数目和跃迁能量。当 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 能隙宽度为 1.75 eV 时,电子的势阱深度为 0.15 eV,势阱内有两条能级,可见,它不仅会发生带间跃迁,还可以发生带内跃迁;而这时空穴的势阱深度为 0.07 eV,势阱内只有一条能级,可见,它不会发生带内跃迁,但是可以发生带间跃迁。表 2 给出的跃迁能量为 1.68 eV。

表 2 在不同能隙下,电子和空穴的势阱深度、能级数目与基态到基态的带间跃迁

Table 2 Potential well depth, level number and transition energy from band to band for an electron and a hole in variable energy gap

$E_{g, GaAlAs}/\text{eV}$	V_{c0}/eV	V_{h0}/eV	N_e	N_h	E_{0-0}/eV
1.65	0.08	0.04	1	1	1.63
1.75	0.15	0.07	2	1	1.68
1.85	0.22	0.10	3	2	1.72
1.95	0.29	0.13	3	2	1.75
2.05	0.36	0.16	4	2	1.78
2.15	0.43	0.19	4	3	1.80
2.25	0.50	0.22	4	3	1.83

3.3 辐射复合

关于量子阱的光发射和光吸收问题,人们从 20 世纪 80 年代就开始关注了,至今仍然是半导体物理的热点之一。事实上,Dawson 在 1983 年指出 $Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ 量子阱的室温荧光峰就是空穴子带自由激子之间的辐射复合发出的荧光。要对量子阱的光学性质作出比较符合实际的理论描述,还必须从激子包络满足的 Schrödinger 方程出发,进一步研究这些激子、特别是自由激子间的辐射复合。下一步工作将对这个问题进行讨论。

3.4 辐射谱分布

对于自发辐射,更详细的分析应当进一步计算辐射谱分布^[10-11],其表达式为

$$\frac{dI}{d} = \frac{1}{2} \frac{1}{c^2} \sum_{m,n} \sum_{mn} X_{mn}^2 P_n \left[\frac{(1 - \cos^2)^2 - (1 - \cos^2) \sin^2 \cos^2}{(1 - \cos)^5} \right] \quad (23)$$

式中: $1/137$ 是精细结构常数; v/c 是电子无量纲运动速度; ω_{mn} 是电子从 m 态到 n 态的跃迁频率, X_{mn} 是从 m 态到 n 态的跃迁矩阵元; P_n 是电子占据第 n 个能态的占据几率。 k 矢量在 (x, y) 平面内的投影与 x

轴之间的夹角。

4 结 论

“方形势阱是最简单的量子阱,由于它过于简单化和理想化,不能完全准确地描述电子的运动行为,因此人们不断寻找新的相互作用势。我们引入反比相关的双曲余弦平方势来描述量子阱中电子的运动行为。在量子力学框架内,把电子的 Schrödinger 方程化为了超几何方程,用系统参数和超几何函数严格地求解了电子的本征值和本征函数,并以 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子阱为例,计算了电子的带内跃迁和带间跃迁,结果由公式(18),(20)和(22)给出。从计算结果可以看出,阱内的能级数目和电子跃迁能量与阱深、阱宽等系统参数有关,只需适当调节这些参数就可实现对超晶格量子阱光电特征的调节与控制。

参考文献:

- [1] Korol A, Solovoyov A V, Greiner W. Coherent radiation of an ultrarelativistic charged particle channelled in a periodically bent crystal[J]. *J Phys G*, 1998, **24**: L45-50.
- [2] Korol A, Solovoyov A V, Greiner W. Photon emission by an ultrarelativistic particle channelling in a periodically bent crystal[J]. *Int J Mod Phys E*, 1999, **8**: 49-57.
- [3] 罗诗裕, 胡西多, 邵明珠, 等. 1 维晶化束的辐射能损与束流冷却[J]. 强激光与粒子束, 2003, **15**(7): 713-716. (Luo S Y, Hu X D, Shao M Z, et al. Radiation energy loss and cooling of 1-dimensional crystallization beams. *High Power Laser and Particle Beams*, 2003, **15**(7): 713-716)
- [4] 罗诗裕, 邵明珠, 韦洛霞, 等. 位错动力学与系统的全局分叉[J]. 物理学报, 2004, **53**(6): 1219-1225. (Luo S Y, Shao M Z, Wei L X, et al. The dislocation dynamics and the bifurcation of system. *Acta Phys Sin*, 2004, **53**(6): 1219-1225)
- [5] 胡西多, 邵明珠, 罗诗裕. 2 维晶化束的平均场概念与单粒子模型() [J]. 高能物理与核物理, 2004, **28**(2): 196-199. (Hu X D, Shao M Z, Luo S Y. Average field idea and single particle model for 2-dimension crystallization beams(). *HEP & NP*, 2004, **28**(2): 196-199)
- [5] 韦洛霞, 邵明珠, 罗诗裕. 沟道辐射谱线的非线性展宽[J]. 原子核物理评论, 2004, **21**(1): 57-61. (Wei L X, Shao M Z, Luo S Y. Nonlinearity effects on width of spectral line of channelling radiations. *Nucl Phys Rev*, 2004, **21**(1): 57-61)
- [6] 罗诗裕, 邵明珠, 马如康. 形变超晶格的沟道效应与系统的相平面特征[J]. 原子核物理评论, 2002, **19**(4): 407-410. (Luo S Y, Shao M Z, Ma R K. Channelling effect of strained superlattice and phase planar characteristics of system. *Nucl Phys Rev*, 2002, **19**(4): 407-410)
- [7] 林钧锋, 庄榕榕, 周小方, 等. 应变超晶格的退道效应与系统的全局分叉[J]. 原子核物理评论, 2003, **20**(1): 55-60. (Lin J F, Zhuang R R, Zhou X F, et al. Dechannelling effects of strained superlattice and global bifurcation in system. *Nucl Phys Rev*, 2003, **20**(1): 55-60)
- [8] 王祝溪, 郭登仁. 特殊函数概论[M]. 北京: 北京大学出版社, 2000: 235-238. (Wang Z X, Guo D R. Introduction of Special Function. Beijing: Peking University Press, 2000: 235-238)
- [9] Haar D T Problems in quantum mechanics[M]. London: Infosearch Limited, 1960: 135-139.
- [10] 罗诗裕, 邵明珠. 等效磁场与弯晶沟道效应[J]. 原子核物理评论, 2003, **20**(4): 415-420. (Luo S Y, Shao M Z. Effect magnetic field and channelling effect of bend crystal. *Nucl Phys Rev*, 2003, **20**(4): 415-420)
- [11] 罗诗裕, 周小方, 林钧锋, 等. 形变超晶格的位错模型与粒子的退道效应[J]. 半导体学报, 2003, **24**(5): 485-489. (Luo S Y, Zhou X F, Lin J F, et al. Dislocation model for strained superlattice and dechannelling effects of a particles. *Chin J of Semiconductors*, 2003, **24**(5): 485-489)

Description of electron transition in superlattice quantum well by $\text{ch}^{-2}x$ potential

LUO Xiao-hua¹, SHAO Ming-zhu²

(1. College of Electrical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. Dongguan University of Technology, Dongguan 523106, China)

Abstract: An interaction potential with $\text{ch}^{-2}x$ form is introduced to describe the electron motion in superlattice quantum well, and in the frame of quantum mechanics, Schrödinger equation is transformed to the hypergeometric equation by this potential. The eigenvalue and the eigefunction of the system are calculated, and the distribution and the level number in quantum well are also discussed. As an example, the transition energy between two bands for material $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ is calculated. It shows that the level number and the transition energy are related to the system parameters, such as the potential well depth, width etc. The photo-electric properties of superlattice materials can be controlled and regulated by regulating the system parameters.

Key words: Superlattice; Quantum well; Electron transition; Hyperbolic cosine squared potential; Hypergeometric equation; Single particle level