



北京大学

博士研究生学位论文

题目: $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁的研究

姓 名: 雷 双 瑛

学 号: 10304872

院 系: 物理学院

专 业: 凝聚态物理

研究方向: 半 导 体

导 师: 沈 波 教授

二〇〇六年六月

北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：雷双珠 日期：2006年6月19日

学位论文使用授权说明

本人完全了解北京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：
按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版本；
学校有权保存学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务；
学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；
在不以赢利为目的的前提下，学校可以公布论文的部分或全部内容。

（保密论文在解密后遵守此规定）

论文作者签名：雷双珠 导师签名：

日期：2006年6月19日

摘 要

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱具有大的导带偏移、强的极化效应、大的LO声子能量和大的电子有效质量等特点。大的导带偏移有利于在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中获得短波长的子带间跃迁，其跃迁波长可达光纤通信波段，大的LO声子能量和大的电子有效质量有利于获得超快的载流子弛豫机制。因此， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱的子带间跃迁在光纤通信中有着广阔的应用前景，备受国际上关注。本文利用自洽求解薛定谔方程和泊松方程的方法研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的子带间跃迁，在计算中考虑了交换关联势，并将极化场不连续作为拟合参数进行了数值计算。主要研究内容和取得的主要研究结果如下：

(1) 强的极化感应电场使得具有对称结构的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构、波函数分布和电子分布变得不对称，两个量子阱之间出现一个大的电势降落，双量子阱中相应的子带对之间出现一个大的Stark shift，从而子带对之间的共振被解除，子带波函数主要分布在其中一个量子阱中。

(2) 研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中极化场不连续和量子阱的结构参数对子带间跃迁波长和吸收系数的影响。双量子阱中第一奇序子带到第二偶序子带($1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$)间跃迁的波长和吸收系数随着极化场不连续的增大而减小。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁的波长随着中间耦合势垒层Al组份的增加变化不明显，而吸收系数随该层Al组份的增加先变大后变小，当Al组份为0.45时，吸收系数具有最大值。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁的波长随着耦合势垒层厚度的增加而增加，而吸收系数却随着该层厚度的增加而减小。

(3) 研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中极化场不连续和结构参数对量子阱中子带对的anticrossing gap的影响。确认极化场不连续对anticrossing gap几乎没有影响，而anticrossing gap随着中间耦合势垒层Al组份和厚度的增加而减小。当耦合势垒层厚度大于2 nm时，anticrossing gap接近为0，表明仅当该层厚度小于2 nm时，两个量子阱之间才有明显的耦合。

(4) 研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中右边量子阱宽度对双量子阱中子带间跃迁吸收系数的影响，并以此来寻求可实现三能级或四能级的非对称双量子阱结构。确认随右边量子阱变宽， $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数变小，而 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁

吸收系数变大。当右边量子阱宽度小于2.28 nm时，随量子阱变宽， $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数变大；当右边量子阱宽度大于2.28 nm时，随量子阱变宽，该吸收系数变小。因此，随右边量子阱变宽，不同子带间跃迁吸收系数存在两个交点，当 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数相交时可实现三能级系统，当 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁的吸收系数相交时可实现四能级系统。为了降低 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱材料的生长难度，提出了用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 代替GaN作为右边量子阱的阱材料，可使左边量子阱中的激发态和右边量子阱中的基态发生共振，从而获得三能级系统。在以上所设计的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中，其子带间跃迁波长可分别位于1.3 μm 和1.55 μm 附近，从而可实现工作于光通信波段的超快双色光电子器件。

关键词：自洽计算， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱，子带间跃迁，极化场不连续，中间势垒层，奇序子带，偶序子带。

Study on intersubband transition in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum wells

Shuangying Lei (Semiconductor)

Directed by Prof. Bo Shen

Abstract

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ quantum wells(QWs) are of the large conduction band offset, the strong spontaneous and piezoelectric polarization effects, the large LO-phonon energy and the large electron effective masses. The large conduction band offset leads to the short intersubband transition (ISBT) wavelength within the optical communication wavelength range. The large LO-phonon energy and the large electron effective masses result in the ultrafast carrier relaxation dynamics. Thus, the ISBTs in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ QWs are of promising application to optical communication, and have attracted significant attention. In this thesis, the ISBTs in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double QWs(DQWs) have been investigated by solving the one-electron Schrödinger and Poisson equations self-consistently. The exchange-correlation potential is considered in the calculation, and the polarization field discontinuity is included as a fitting parameter. The main results are introduced as follows:

(1) The strong polarization effects make the conduction band profile, the wavefunction and the electron distribution in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ DQWs asymmetric. There are a large potential drop between the two wells and a large Stark shift between the corresponding subband pairs in the DQWs, and thus there is no resonance between the corresponding subband pairs. Therefore, the wavefunction of each subband is mainly located in one well of the DQWs.

(2) Influence of the polarization field discontinuity and the structural parameters on the wavelength and the absorption coefficient of the ISBT in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ DQWs has been studied. The wavelength and the absorption coefficient of the ISBT between the first odd order and the second even order subbands(the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ ISBT) decrease with

increasing the polarization field discontinuity. With increasing the Al composition of the central barrier, the wavelength of the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ ISBT is almost unchanged, the absorption coefficient of the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ ISBT firstly increases, and then changes to decreases. Thus, the absorption coefficient is of a maximum when the Al composition of the central barrier is 0.45. With increasing the thickness of the central barrier, the wavelength of the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ ISBT increases, the absorption coefficient of the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ ISBT decreases.

(3) Influence of the polarization field discontinuity and the structural parameters on the anticrossing gap of the subband pairs in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ DQWs has been investigated. The polarization field discontinuity has no effect on the anticrossing gap of the subband pairs. The anticrossing gap decreases with increasing the Al composition and the thickness of the central barrier. The anticrossing gap becomes 0 when the central barrier is thicker than 2 nm, indicating that the two wells have a significant coupling when the central barrier is thinner than 2 nm.

(4) Influence of the right well width of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ DQWs on the absorption coefficient of the ISBT in the DQWs has been studied, in order to design the structure of the three- and four-energy-level $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ DQWs. With increasing the right well width, the $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ ISBT absorption coefficient decreases, but the $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ one increases. Meanwhile, with increasing the right well width, the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ one firstly increases, and then changes to decrease when the right well becomes wider than 2.28 nm. Thus, with increasing the right well width, there are two intersecting points between the absorption coefficients of three different ISBTs in the DQWs. The three-energy-level system can be realized when the $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ ISBT absorption coefficient intersects the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ one. The four-energy-level system can be realized when the $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ ISBT absorption coefficient intersects the $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ one. In order to make the growth of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ DQWs easier, GaN QWs of the right well is suggested to be replaced by $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ QWs. The three-energy-level system can be realized when the excited state in the left well resonates with the based state in the right well. In the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ DQWs designed above, the wavelenghtes of the ISBTs are possible to be located around 1.3 μm and 1.55 μm in the same DQWs, which gives the possible

way to realize the ultrafast two-colour optoelectric devices operating within the optical communication wavelength range.

Keywords: self-consistent calculation, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum well, intersubband transition, polarization field discontinuity, central barrier, odd order subband, even order subband.

第一章 绪论

二十一世纪是一个科技高速发展的信息时代，计算机的迅速发展、生产自动化、国际互联网、无线移动电话、卫星通讯等无不展示着信息技术的辉煌。继蒸汽机后，信息技术又一次改变了人们的生活，从而促使人类社会飞跃发展。作为信息技术的基础，各类微电子、光电子器件也已经和正在以惊人的速度、广度和深度，应用于天文、海洋、物理、生化、医疗、公安、工业、农业和军事领域，使其发生日新月异的变化，对人们的生活也产生了深远的影响。传统半导体在许多方面已经不能满足日益发展的需求。汽车引擎、功率分配系统、电动交通工具、航空电子设备、微波通讯等，都需要适用于高温、高频、大功率的电子器件。全色显示、高密度的信息储存、高清晰的激光打印和长距离的光纤通信等要求短波长的发光二极管、激光器、探测器和光开关。

Ge、Si 是最早实现无位错晶体生长、最早用来制造晶体管、最早商业化的半导体材料，它们具有技术成熟、质量好、成本低廉等特点，在现代信息科技和产业中发挥着极其重要的作用，被称为第一代半导体。GaAs、InP、GaP、InAs、AlAs 等化合物半导体及其合金与第一代半导体材料相比，用它们制造的电子器件具有更高的频率、更高的增益、更低的噪声等特点；而且它们属于直接带隙半导体材料，是制备发光二极管和半导体激光器的理想材料，在数字移动通信、光纤通信、全球定位、导航等领域中已发挥重大作用，被称为第二代半导体。宽禁带 ($E_g > 2.3$ eV) 半导体材料包括 III 族氮化物 (又称 GaN 基半导体)、SiC、ZnSe、金刚石、ZnO 等，被称为第三代半导体。其中 GaN 基半导体是最重要的一类宽禁带半导体，具有大的带隙、高的击穿电场、高的电子饱和漂移速度、强的抗辐射能力等优点，用它非常适合研制高温、高功率微波器件和在恶劣环境下工作的各类电子器件。除此之外，宽禁带半导体还属于直接带隙半导体，用它们可以制造短波长的发光二极管、激光二极管和应用用于光纤通讯系统的光电子器件。第三代半导体材料和第一代、第二代半导体相比，具有成本高、单晶生长不完美、工艺技术不够成熟等特点，致使它们的优异性能还没有得到充分的利用。因此第三代半导体材料及其器件性能还有待进一步研究和提高性能。在第三代半导体中，III 族氮化物半导体材料和器件研究近年来发展十分迅猛，已成为当前国际上最为活跃的半导体研

究领域之一。

1.1 III族氮化物(GaN 基)半导体的基本性质

自从 1952 年威克研究了III-V 族化合物半导体性质以后的三十年中,无论在III-V 族化合物的制备、物性的研究还是在应用研究方面都取得了巨大的进展。该化合物半导体所构成的异质结构(如单异质结[1,2]、量子阱[3]、量子线[4]、量子点[5,6]、超晶格等[7,8])具有非常独特的性质,在高电子迁移率晶体管[9,10]、大功率微波二极管等电子器件[11,12],以及蓝光或紫外发光二极管[13,14]、激光器[15]、探测器等短波长光电子器件方面都有着广泛的应用[16,17]。另外,在III-V 族化合物中掺入锰、铬等磁性杂质所形成的稀磁半导体材料是实现自旋电子器件的重要材料之一[18,19]。尤其是三元或三元以上的化合物半导体,由于其能带结构和带隙宽度随组份变化,从而为III-V 族化合物半导体材料的应用开辟了更广阔的领域。

1928 年 Johnson 等人首先合成 GaN 薄膜[20]。GaN 具有高强度、抗常规湿法腐蚀的特点。在室温下不溶于水和酸,不溶于 NaOH 溶液。GaN 具有宽的直接带隙、高的热导率和热稳定性、高的临界击穿电压、大的迁移率、抗辐射,抗腐蚀等诸多优异的物理特性。

1.1.1 GaN 基半导体的能带结构

III 族氮化物材料的电子能带结构研究始于上个世纪 60 年代末 70 年代初。由 AlN、GaN、InN 及其合金 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 构成的 III 族氮化物是直接带隙半导体,其带隙宽度从 InN 的 0.8eV 到 GaN 的 3.4eV 和 AlN 的 6.2eV 连续可变[21],相对应的波长覆盖了从红、黄、绿到紫外光的范围[22-25]。同时由 AlN、GaN、InN 及其合金 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 构成量子阱具有大的导带偏移,其子带间跃迁波长覆盖了中红外、近红外光的范围,甚至实现光纤通信波长也不是难事。因此 GaN 基材料是发展从红外光到可见光再到紫外光波段半导体发光器件、光探测器件的理想材料[26-28]。GaN 及其合金构成的宽带隙的 III 族氮化物半导体材料具有禁带

宽度大、击穿场强高、热导率大、电子饱和漂移速度高、抗辐照能力强、化学稳定性好等独特的特性，使其在高频大功率器件、高温电子器件等方面倍受青睐[29-32]。因此，III 族氮化物被称为应用前景十分广阔的第三代半导体材料，成为近年来半导体光电子学、微电子学研究的热点[33,34]。

当 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 GaN 结合在一起时，由于它们的禁带宽度不同，能带会在界面处发生突变，从而形成能带的不连续性。GaN 和 AlN 的禁带宽度差高达 2.8eV，且 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 与 GaN 的禁带宽度差大部分分布在导带，Wei 的研究小组通过计算表明 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 导带不连续是禁带宽度差的 70% [35,36]。导带或价带的不连续性对异质结的电学性质和光学性质有着显著的影响。大的导带不连续一方面有利于对 2DEG 的限制，增加 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构界面处的最大 2DEG 浓度[37,38]。另一方面有利于获得更深的量子阱，从而使子带间跃迁具有很短的波长。

1.1.2 GaN 基异质结构中的极化效应

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构除了具有大的导带不连续外，还具有大的自发极化和压电极化效应。III 族氮化物的压电系数很大，见表 1。同时，Bernardini 等人预言了 III 族氮化物中自发极化系数也很大，和 ZnO 相当[39]，并且从 GaN 到 InN 再到 AlN 依次增加。这使得 GaN 上 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层中的极化场可高达~MV/cm。

III 族氮化物具有三种晶体结构：六方密堆的纤锌矿结构[40]、立方密堆的闪锌矿结构和盐矿结构（NaCl 结构）[41]。在某种条件下，在（001）Si、（001）GaAs、3C-SiC 或 MgO 等立方结构的衬底材料上生长出亚稳态立方对称的闪锌矿结构的 III 族氮化物（ β -GaN 或 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ）[42]。闪锌矿结构的 III 族氮化物可以看成是分别由 N 原子和 Ga（Al、In）原子组成的两套面心立方结构沿对角线方向错开 1/4 所组成。迄今为止，在这些衬底上生长的闪锌矿结构的 III 族氮化物的缺陷密度都很高，大多数缺陷属于微孪晶和堆积层错，其原因在于严重的晶格失配和热失配。在非常高的压强（50GPa）下 GaN 或其他 III 族氮化物材料还可以通过相变成为岩盐晶格结构[43]。立方结构的 III 族氮化物没有自发极化效应，因而非常有利于光电子器件方面的应用。在蓝宝石（ $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ）、6H/4H SiC、Si（111）、GaAs（111）或 MgAl_2O_4 （111）等衬底上可以生长出六方密堆的纤锌矿结构的 III 族氮化物。

纤锌矿结构的 III 族氮化物可以看成是分别由 N 原子和 Ga (Al、In) 原子组成的两套六角密堆结构所组成的，这两套密堆结构沿 c 轴方向错开 $3c/8$ 。其中 c 为六角密堆结构沿[0001]方向的晶格常数。对于纤锌矿结构的 III 族氮化物可以用 u 来表示 Ga 离子 (Al、In) 和 N 离子之间沿 c 轴方向的键长，它等于 $3c/8$ 。纤锌矿结构的 III 族氮化物与闪锌矿的结构的 III 族氮化物相比具有许多新的特点。JuZa 和 Hahn 首次报道了六方对称的纤锌矿结构的 GaN[44]，纤锌矿 GaN (α -GaN) 是热力学上的稳定结构。

Wurtzite	AlN	GaN	InN	BN
a_0 (Å)	3.112	3.189	3.54	2.534 ^e
c_0 (Å)	4.982	5.185	5.705	4.191 ^e
c_0/a_0	1.601	1.627	1.612	1.654 ^e
	1.619 ^a	1.634 ^a	1.627 ^a	...
u	0.380 ^a	0.376 ^a	0.377 ^a	0.374 ^e
$P_{sp}(C/m^2)$	-0.081 ^a	-0.029 ^a	-0.032 ^a	...
$e_{33}(C/m^2)$	1.46 ^a	0.73 ^a	0.97 ^a	...
	1.55 ^b	1 ^c	...	...
	...	0.65 ^d	...	...
	1.29 ^e	0.63 ^e	...	-0.85 ^e
$e_{31}(C/m^2)$	-0.60 ^a	-0.49 ^a	-0.57 ^a	...
	-0.58 ^b	-0.36 ^c	...	...
	...	-0.33 ^d	...	...
	-0.38 ^e	-0.32 ^e	...	0.27 ^e
$e_{15}(C/m^2)$	-0.48 ^b	-0.3 ^e	...	...
	...	-0.33 ^d	...	...
ϵ_{11}	9.0 ^b	9.5 ^f	...	...
ϵ_{33}	10.7 ^b	10.4 ^f	14.6 ^g	...

^aReference[45], ^bReference[46], ^cReference[47], ^dReference[48],

^eReference[49,50], ^fReference[51], ^gReference[52].

表 1. III 族氮化物的晶格常数、自发极化、压电极化和介电常数。

对具有非中心对称的纤锌矿结构的氮化物，其原子分布在双原子层上。双原子层由两个非常靠近的六边形（边长为 a_0 ）的原子层组成，其中一个原子层由阴

离子组成 (N)，另一个原子层由阳离子组成 (Ga 或者 Al)，从而导致极化的形成，这种极化就是自发极化。原子层排列顺序可以分为沿 $[0001]$ 方向的 Ga 面（阳离子表面）和沿 $[000\bar{1}]$ 方向的 N 面（阴离子表面）。对于 Ga(Al)面，意味着 Ga(Al)原子在 $\{0001\}$ 双层结构的顶端，对于 N 面，意味着 N 原子在双层结构的顶端。在这里，正方向或者 $[0001]$ 方向定义为从阳离子 Ga(Al)沿着 c 轴指向最近邻的阴离子 N 的方向，因此，自发极化的符号总是负的，见表 1。因此，对于 Ga(Al)面，自发极化指向衬底，而对于 N 面，自发极化指向外延层。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 (0001) 面和 $(000\bar{1})$ 面在化学和物理性质上是不同的。图 1 分别为 Ga(Al)面和 N 面 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 结构示意图[58]。

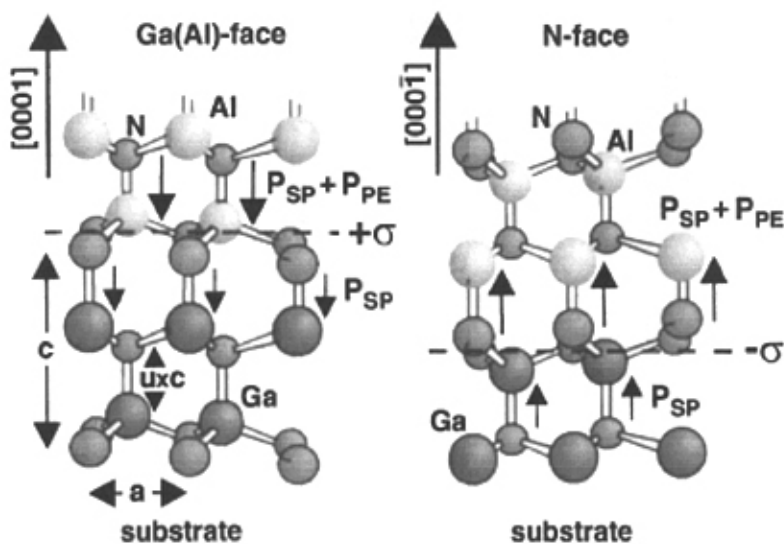


图 1 Ga 面和 N 面 GaN 结构示意图。

图 2 所示为 Ga(Al)面和 N 面 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 和 $\text{GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 异质结构中的自发极化和压电极化方向以及界面极化电荷示意图[57]。其中 $\mathbf{P}_{\text{SP}}$ 为自发极化矢量， $\mathbf{P}_{\text{PE}}$ 为压电极化矢量， $\pm\sigma$ 为异质界面处极化面电荷的大小，前面的正负号表示其电性。在图 2(b)和图 2(e)所示的结构中，由于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 产生张应变，其中的自发极化和压电极化的符号同为负，因而 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中的自发极化和压电极化的效果互

相增强。而在图 2(c)和图 2(f)所示的结构中，由于 GaN 产生压应变，其中的压电极化符号为正，因此 GaN 中的自发极化和压电极化符号相反，其自发极化和压电极化的效果相互减弱。实验研究表明，MOCVD 生长的 GaN ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) 是 Ga(Al) 面的。

III 族氮化物的晶格常数随其组份的变化非常明显，从而引起异质结构较大的晶格失配，如 GaN 和 AlN 具有 2.5% 的晶格失配，而 GaN 和 InN 的晶格失配则高达 11%。对于生长在 GaN 缓冲层上的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构，由于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和

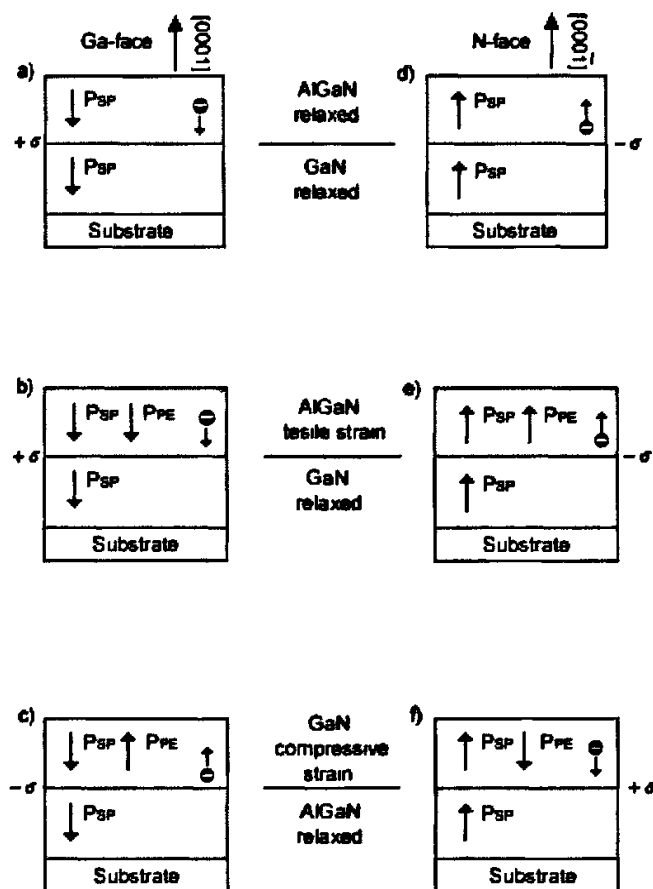


图 2 不同结构中的压电极化和自极化。

GaN 的晶格常数不完全匹配，在外延层足够薄的情况下，可实现共生长以补偿晶格失配。此时的外延层是应变层，它的晶格常数将发生变化，从而产生压电极

化。在小应变的情况下，压电极化可由下面的式子决定，

$$P_{PE} = 2 \frac{a - a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right), \quad (1)$$

其中 e_{31} 和 e_{33} 为压电系数， C_{13} 和 C_{33} 为弹性常数， a 和 a_0 分别为应变和弛豫时的晶格常数。它们可由表 2 给出。对任意 Al 组份的 $Al_xGa_{1-x}N$ ，下面的不等式恒成立，

$$\left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) < 0. \quad (2)$$

从以上两个式子可知，对张应变，压电极化是负的，和自发极化同向；对压应变，压电极化是正的，和自发极化反向。压电极化随应变的增大而增大，并且在同样应变的情况下，压电极化从 GaN 到 InN 再到 AlN 依次增加。

GPa	AlN		GaN		InN	
	exp. ^a	cal. ^b	exp. ^c	cal. ^b	exp. ^d	cal. ^b
Wurtzite						
C_{11}	345	396	374	367	190	223
C_{12}	125	137	106	135	104	115
C_{13}	120	108	70	103	121	92
C_{33}	395	373	379	405	182	224
C_{44}	118	116	101	95	10	48

^aReference[53], ^bReference2[54], ^cReference[55], ^dReference4[56].

表 2. III 族氮化物的弹性常数。

总的极化为压电极化和自发极化之和，即 $P_{total} = P_{PE} + P_{SP}$ 。由于 $\rho_P = -\nabla P$ ，类似地，对于 Ga(Al)面，在异质结构上下两层的突变界面处，极化电荷面密度为

$$\sigma(P_{SP} + P_{PE}) = P(bottom) - P(top) = \sigma(P_{PE}) + \sigma(P_{SP}). \quad (3)$$

对于 N 面，在异质结构上下两层的突变界面处，极化电荷面密度为

$$\sigma(P_{SP} + P_{PE}) = P(top) - P(bottom) = \sigma(P_{PE}) + \sigma(P_{SP}). \quad (4)$$

因此，对于 Ga(Al)面，如果 $Al_xGa_{1-x}N$ 在 GaN 上面，则在其界面处将形成正的极化电荷，如果 GaN 在 $Al_xGa_{1-x}N$ 上面，则在其界面处形成负的极化电荷。对于 N 面，如果 $Al_xGa_{1-x}N$ 在 GaN 上面，则在其界面处形成负的极化电荷，如果 GaN 在

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 上面, 则在其界面处形成正的极化电荷。

由于极化电荷的存在, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和 GaN 中将出现极化感应电场, 从而导致其能带发生弯曲。在异质结界面处形成电子或者空穴量子阱, 从而诱导产生很高密度的二维电子气或者二维空穴气[57,58]。极化场还可以用来增加 III 族氮化物的等效肖特基势垒高度[59]。另外极化效应也有利于在 $p\text{-GaN}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 中形成自由空穴积累层[60], 这种机制可以增加 GaN 基 HBTs 基区的二维空穴气浓度或者增加 p 型欧姆接触区的有效 p 掺杂浓度。另一方面, 对多量子阱, 极化场使其能带弯曲, 从而不再具有 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 多量子阱那样的平带。对于厚的量子阱, 极化场减小了量子阱的有效阱宽, 并且使量子阱限制的电子和空穴在空间上分开, 这将使得带间跃迁的概率大大减小, 其波长发生红移。这也将进一步影响 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 多量子阱的物理性质。

O'Clock, Duffy 和 Tsubouchi 等人通过测量生长在蓝宝石上的外延层的耦合系数得到了 GaN 和 AlN 的压电常数[46,47]。Bernardini 等人和 Shimada 等人分别计算了 GaN、InN、AlN、BN 晶体中的压电常数[45,50]。其中, $e_{33}(\text{AlN})$ 和 $e_{31}(\text{AlN})$ 的计算值和测量值符合较好, 但是由不同小组实验测量或者理论计算的 $e_{31}(\text{AlN})$ 和 $e_{33}(\text{AlN})$ 之间差别高达 30%。Shimada 还预言, GaN 和 AlN 的 e_{33} 和 e_{31} 随着张应变的增加而大大减小, 并且, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的 $|e_{33}|$ 和 $|e_{31}|$ 随着 Al 组份的增大而减小。

在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中, 压电极化强度取决于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 层中的应变, 但是, GaN 上的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的应变弛豫机制和压电系数随应变的变化目前还不清楚。沈等人发现 GaN 上生长的 $\text{Al}_{0.22}\text{Ga}_{0.78}\text{N}$ 层的临界厚度比理论计算预言值大得多[61]。

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构中的自发极化和压电极化效应是目前研究的热点, 还有待深入研究。

1.2 GaN 基多量子阱中的子带间跃迁

1.2.1 光纤通信基础

现代通信的三大支柱是光纤通信、卫星通信和无线电通信, 而其中光纤通信

是主体。1966 英籍华人高银博士首次提出在透明的石英玻璃丝即光导纤维中传送光信号的设想，从而在全世界范围内掀起了发展光纤通信的高潮。光纤通信是利用激光作为载波，用光导纤维作传输媒质传递信息的“有线”激光通信，其工作在近红外区，波长是 $0.8\sim 1.8\ \mu\text{m}$ ，对应的频率为 $167\sim 375\ \text{THz}$ 。光纤通信与电通信的主要差异有两点：一是用光频作为载频传输信号，二是用光缆作为传输线路。光纤通信除了可以用来传送声音以外，还可以传送电视图像、数据、图表等。它与电通信的主要差异有两点：一是用光频作为载频传输信号，二是用光缆作为传输线路。光纤通信主要具有以下优点：(1)传输频带宽，通信容量大；(2)损耗低，传输距离远；(3)抗电磁干扰能力强，传输质量佳；(4)信号串扰小，保密性能好；(5)线径细，重量轻；(6)材料来源丰富，制造成本也在迅速降低；(7)光缆适应性强，寿命长。

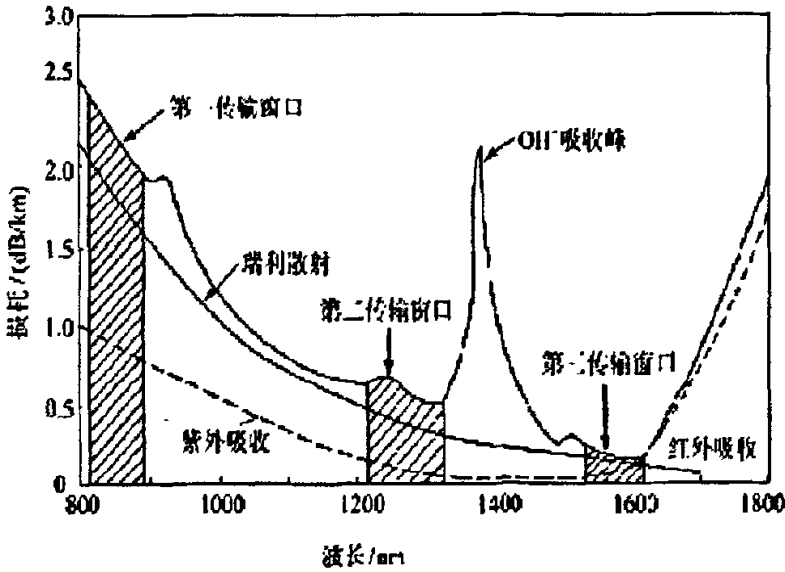


图 3 光纤中的光损耗。

光在传输过程中总会存在一定的损耗，损耗是光纤的一个重要传输参量，是光纤传输系统中继距离的主要限制因素之一。正如图 3 所示，在光的损耗谱中有三个低损耗窗口：第一低损耗窗口在短波长 $0.85\ \mu\text{m}$ 附近；第二低损耗窗口在长波

长 $1.31\ \mu\text{m}$ 附近; 第三低损耗窗口在长波长 $1.55\ \mu\text{m}$ 附近; 在这三个低损耗窗口中, $1.55\ \mu\text{m}$ 的窗口损耗最低, 窗口最宽, 从而对于实际应用最为有利。

图 4 为光纤通信系统的组成。从原理上看, 构成光纤通信的基本物质要素是光源、光纤和光检测器。

光纤通信对光源有以下几点要求: 光源应在光纤的三个低损耗窗口工作, 即发光波长为 $0.85\ \mu\text{m}$ 、 $1.31\ \mu\text{m}$ 或 $1.55\ \mu\text{m}$; 光源的谱线宽度较窄, $\Delta\lambda=0.1\sim1.0\ \text{nm}$; 能提供足够的输出功率, 可达 $10\ \text{mW}$ 以上; 光源与光纤耦合效率高, $30\%\sim50\%$; 能长时间连续工作, 工作稳定。因此, 半导体激光器 (LD) 非常适合于高速率长距离的光纤通信系统[62]。

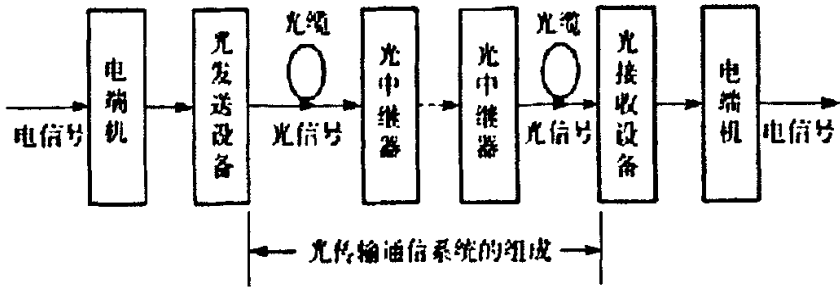


图 4 光纤通信系统的组成。

光开关的主要任务是切换光路。光开关与光开关阵列是光纤通信系统重要的光电子器件, 随着光纤通信技术的发展, 特别是数据通信和密集波分复用(DWDM)系统的应用, 复杂的网络拓扑对可靠、灵活的网管产生了强烈的需求。DWDM 在城域网和接入网的应用对具有插/分和交换功能的光开关的需要更加迫切。随着网络转向全光平台, 光域优化、光交叉连接、路由选择、保护和自愈的网络功能已成为关键, 这一切都离不开光开关。而光调制器是光开关的重要组成部分, 半导体光调制器最大的特点在于其调制速率可以达到 $100\ \text{Gb/s}$ 以上, 而且其消光比值非常高, 又有外调制器的极低啁啾和啁啾可控特性, 因此半导体光调制器是光纤通信的首选调制器[63]。

光探测器是光检测器的主要组成部分, 是光信号的接收器件, 它能够把光信号变成电信号。光探测器必须满足以下要求才能成功的应用于光纤通信系统并完

成光电转换：具备高的光电转换效率；足够高的响应速度，或有大的带宽（热探测器则不能）；高的接收灵敏度，即能探测极微弱的光信号，对此，检测器应有很低的噪声；低的功耗和长的寿命。半导体材料的量子阱光探测器能够很好的满足以上条件[64]。

以上这些元器件的实现还有赖于光电子技术的进步，它们将在未来的光纤通信网络中起着重要的作用，因而各个从事光电子研究的研究小组都在致力于各种高性能器件的开发，材料及制作工艺的研究。

1.2.2 GaN 基材料的电声子相互作用基础

晶格振动和电声子相互作用是固体理论研究的基本内容之一，它们对固体的物理性质有着极其重要的影响。极性半导体有四类声子模式：它们分别是横声学支（TA）、纵声学支（LA）、横光学支（TO）和纵光学支（LO）[65]。这四类声子与导带电子之间存在以下相互作用：TA 声子与电子之间的变形势相互作用、LA 声子与电子之间的变形势和压电相互作用、LO 声子与电子之间的 Fröhlich 相互作用。半导体中的光学声子的典型能量是几十 meV，因此，在非常低的温度下，大部分电子没有足够的能量来发射光学声子。但在室温下，电子可以有足够的能量发射光学声子，并且在极性半导体中，Fröhlich 电声子相互作用非常强烈，因此，室温下光学声子的发射远远超过声学声子的发射而占主导地位。Fröhlich 电声子相互作用将对半导体的许多物理性质都有重要的影响，如能量的耗散、热电子的弛豫、激子的非辐射复合、室温激子的寿命、带间跃迁的速率等。

在极性晶体中，导带底部的电子会通过库仑相互作用使周围的晶格发生畸变，晶格畸变会产生一个围绕电子的极化场，这个极化场又反作用于电子使电子的运动状态发生变化，并伴随电子在晶格中运动，电子和其周围的极化场作为一个整体被称为极化子。从场论的观点来看，伴随电子运动的晶格畸变或极化场可以用 LO 声子来描述，而电子与极化场的相互作用则可以用 Fröhlich 相互作用来描述。极化子的哈密顿量 $H_{polaron}$ 由导带电子的能量 H_e 、LO 声子的能量 H_{ph} 、Fröhlich 电声子相互作用的能量 H_{e-ph} 三部分组成[66]。即：

$$H_{polaron}=H_e+H_{ph}+H_{e-ph}, \quad (5)$$

其中 H_e 、 H_{ph} 、 H_{e-ph} 可以表示为

$$H_e = \frac{\hat{p}^2}{2m^*}, \quad (6)$$

$$H_{ph} = \sum_q \left(\eta \omega_{LO} + \frac{1}{2} \right) \hat{a}^+(q) \hat{a}(q), \quad (7)$$

$$H_{e-ph} = \sum_q \left[V_q \hat{a}(q) e^{iq \cdot r} + V_q^* \hat{a}^+(q) e^{-iq \cdot r} \right], \quad (8)$$

其中 V_q 可以写成

$$V_q = i \frac{\eta \omega_{LO}}{q} \left(\frac{\eta}{2m^* \omega_{LO}} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{8\pi^2}{\omega_{LO}} W_0 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (9)$$

这里 η 是约化普朗克常数, ω_{LO} 是 LO 声子的角频率, m^* 为电子有效质量, q 为声子波矢, $\hat{p}$ 为动量算符, $\hat{a}^+(q)$ 和 $\hat{a}(q)$ 分别为声子产生和消灭算子。 W_0 是 Fröhlich 相互作用的基本速率, 它的量纲是时间的倒数。 W_0 可以表示为[67]:

$$W_0 = \frac{e^2}{4\pi\eta} \left(\frac{2m^* \omega_{LO}}{\eta} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right], \quad (10)$$

其中, ϵ_∞ 和 ϵ_s 分别表示光学和静态介电常数。

1.2.3 量子阱中子带间跃迁的物理图像

自从 1983 年 Smith 等人从实验上发现并研究了 GaAs 基多量子阱中子带之间的跃迁[68], 继而 1985 年 West 等人发现 GaAs 基多量子阱中子带之间的红外吸收具有很大的振子强度[69], 具有实现红外辐射探测器的潜力以来, 量子阱中子带之间的电子跃迁就引起了广泛的关注。

量子阱中的电子跃迁可以分为带间跃迁和带内跃迁。带间跃迁是电子吸收光子从价带量子阱中子带穿过禁带到导带量子阱中子带的跃迁(如图 5: HH1-→CB1), 这种跃迁将会在半导体中产生电子空穴对, 从而不需掺杂就可以实现带间跃迁。带内跃迁是电子吸收光子从导带量子阱中基态子带到激发态子带之间的跃迁(如图

5: CB1→CB2)。这种子带间跃迁不能产生电子空穴对，需要通过掺杂来提供载流子，从而实现子带间跃迁。与带间跃迁相比，子带间跃迁的波长处于红外波段、具有大的振子强度、快的弛豫或响应时间。子带间跃迁可以用于实现在室温下连续工作的红外量子级联激光器、室温下工作的量子阱红外探测器、高灵敏度的照相机、超快的全光学波导开关等。所有这些器件可以应用于传感器、过程检测系统、无线电通讯发射器和接收器、光纤通信系统等。无论是带间跃迁还是带内的子带间跃迁都可以通过改变量子阱的宽度和势垒层的合金组份来调节跃迁波长，从而实现能带工程的自由剪裁。

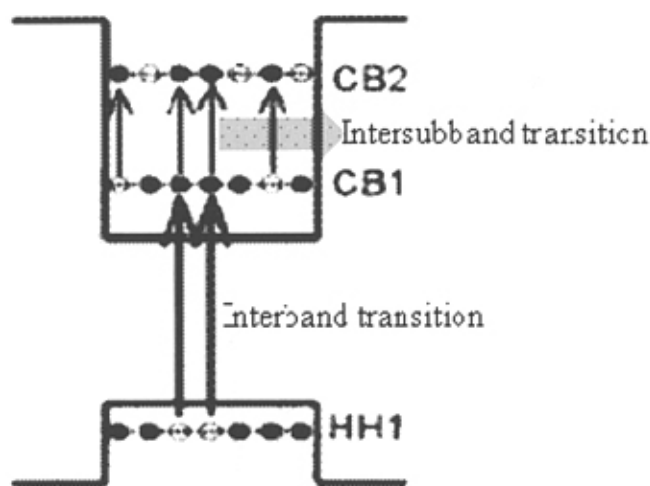


图 5 量子阱的能带结构及带间跃迁和子带间跃迁示意图。

1.2.4 GaN 基量子阱中子带间跃迁的弛豫时间

如果 GaN 基材料导带底色散关系的非抛物线性可忽略，子带间跃迁能量和平行于量子阱的电子波矢相互独立。因此，在忽略电子动能的情况下，子带间的跃迁吸收将主要由最低子带的电子占据数决定。这意味着子带内弛豫时间的贡献是次要的，而子带间弛豫时间的贡献是主要的。子带间的弛豫过程主要取决于 Fröhlich 电声子相互作用。如果采用导模模型来描述限制在量子阱中的 LO 声子，则电子子带间跃迁的弛豫率可以表示为[70,71]：

$$W_{21} = \frac{1}{2}W_0 \left(\frac{\eta\omega_{LO}}{E_1} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{4 - \eta\omega_{LO}/E_1} + \frac{1}{12 - \eta\omega_{LO}/E_1} \right], \quad (11)$$

其中 E_1 表示参与子带间跃迁的较低子带的能量。此时子带间跃迁的弛豫时间可以表示为 $\tau_{ISBT} = 1/W_{21}$ 。

1.2.5 GaN 基量子阱中子带间跃迁的优势

Material parameter		GaN	InGaAs
Effective mass	m^*	$0.2m_0^a$	$0.042m_0^b$
LO phonon energy	$\eta\omega_{LO}$	88meV^a	36meV^b
Dielectric constant	ϵ_∞	5.39^a	11.6^b
	ϵ_s	9.5^a	14.1^b
Basic relaxation rate	W_0	$1.21 \times 10^{14} \text{s}^{-1c}$	$6.66 \times 10^{12} \text{s}^{-1c}$

^aReference[72]. ^bReference[73]. ^cReference[70].

表 3. 与子带间跃迁有关材料参数的比较。

随着经济的发展，科技的进步，现代光纤通信技术也在猛速的发展。人们对语音、图像、数据等信息的需求量呈指数增长，全球数据业务量几乎半年左右就翻一番；二十世纪九十年代以来，IP 网络进入了一个迅速发展的时代，其用户量以 165% 的年增长率在全球增长，IP 业务以每年 300% 的速度增长；基于网络的新业务（如电子商务、电子政务等）不断出现，并得以蓬勃发展；宽带的接入、如 ADSL 等成为人们生活中不可缺少的组成部分；这一切对通信系统容量、尤其是主干网提出了前所未有的带宽需求。从而促使具有巨大带宽和低传输损耗的光纤通信不断朝着高速率、大容量的方向发展。为了满足现代网络对通信带宽的需求，光纤通信技术的发展对全光学器件及器件材料提出了新的要求。

GaN 基材料量子阱中子带间跃迁具有很多优点：由于 AlN/GaN 异质结构的导带不连续很大（ $\sim 2\text{eV}$ ），在 GaN 基量子阱中实现 1.3 和 $1.55\mu\text{m}$ 的子带间跃迁成为可能；另外由于 GaN 基材料的禁带宽度（ $\sim 2\text{eV}$ ）比其 LO 声子能量（ $\sim 88\text{meV}$ ）

大得多，多声子吸收所产生的载流子可以有效地被抑制，从而有效地抑制了载流子所引起的慢响应，使子带间弛豫时间变小；为了提供子带间跃迁所需的载流子，在 GaN 材料中实现高掺杂并不困难；GaN 基材料具有耐高功率激发的特点。

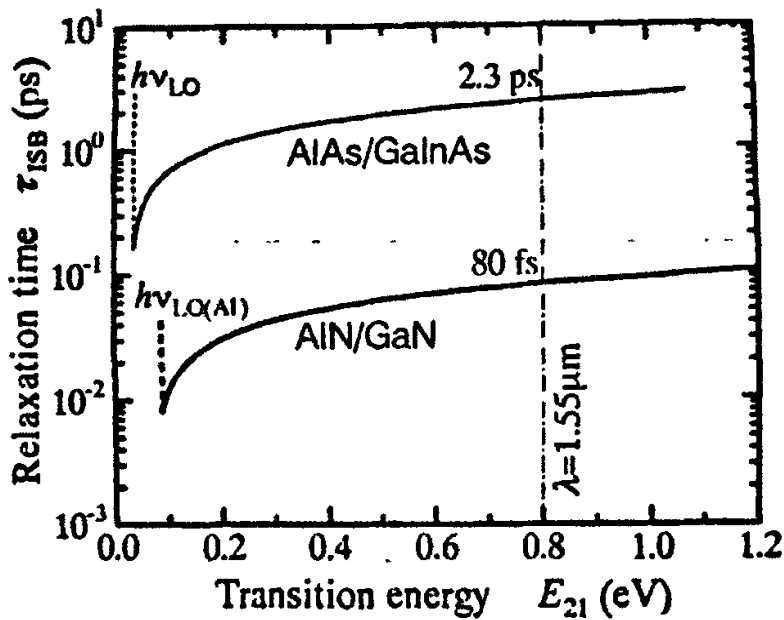


图 6 GaN 和 InGaAs 量子阱中子带间跃迁的弛豫时间的比较[70]。

表 3 给出了与子带间跃迁有关的 GaN 和 InGaAs 材料参数。从表 3 中我们可以看到，GaN 基材料的 LO 声子能量和有效质量都比 GaAs 基材料的大，再加上 GaN 基材料的 $[\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_s^{-1}]$ 也比 GaAs 材料的大，这使得 GaN 基材料的 Fröhlich 相互作用的基本速率比 GaAs 基材料的快两个数量级。因此，GaN 基量子阱中子带间跃迁的弛豫时间比 GaAs 基量子阱短 1~2 个数量级（见图 6）[74]，这将大大提高了基于子带间跃迁的光电子器件的响应速度。当子带间能量间隔大于 LO 声子能量时，GaN 基量子阱中子带间跃迁的弛豫时间还随子带间能量间隔的减小而减小。另外，由于 GaN 基材料具有大的导带不连续，因此 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱非常有利于实现 1.31 和 1.55 μm 的子带间跃迁波长[75]。这对于满足光纤通信技术的快速发展对超快全光学或光电子器件的需求具有非常重要和现实的意义。因而 GaN 基量子阱中子带间跃迁受到了国际上的广泛关注。

1.3 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的研究现状和存在的问题

1997 年 Suzuki 等人理论计算了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的弛豫时间和三阶非线性磁化率。发现在通信波段, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的弛豫时间比 GaAs 基量子阱小约 30 倍, 大约为 100fs, 在相同条件下, 其三阶磁化率比 GaAs 基材料小约 27000 倍。1998 年他们计算了子带内散射, 发现其散射率比 GaAs 基材料大得多, 其消相干时间可短至 10fs, 从而导致其具有宽的三阶非线性磁化率谱[76], 因此, 子带内电子能量弛豫延迟对子带间非线性超快响应的影响很小。所有这些特征都表明 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁对于实现工作在光纤通信波段的超快全光学开关等器件非常有利。

另一方面, 各个研究小组也针对全光学器件的应用进行了各种各样的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的数值模拟和器件设计。2000 年 Suzuki 利用一维有限差分域方法和描述子带间载流子弛豫机制的三能级速率方程对非线性光学波导中飞秒脉冲的传播和栅极工作情况进行了模拟[77]。这种波导是利用 GaN 基量子阱中波长为 $1.55\mu\text{m}$ 的子带间跃迁的饱和吸收工作的。当脉冲宽度小于 200fs 时, 波导的工作速度可达 1-Tb/s。2002 年 Suzuki 为了克服工作于通信波段的子带间吸收不够强的问题, 提出了利用工作于长波长的参考脉冲的子带间吸收所引起的折射率变化来实现干涉栅, 从而提供了利用长波长的强的子带间吸收来控制工作于通信波段的信号脉冲的方法[78]。2003 年 Suzuki 理论研究了光泵 AlN/GaN 子带间跃迁光学放大器中亚皮秒光脉冲的交叉增益调制[79]。它的开关能量比基于 GaN 基量子阱中子带间饱和吸收的开关要小一个量级, 并且在速度高达 1-Tb/s 时也没有严重的形状效应。2005 年他们对超快光学开关进行了模拟, 并研究了非均匀展宽对超快光学开关的影响以及位错密度对器件的饱和特性的影响[80]。他们发现超快光学响应的模拟值和实验测量值符合得非常好, 通过减少位错和优化结构, 开关脉冲能量将得到提高。

1999 年 Iizuka 等人第一次从实验上观察到了用 MOCVD 生长的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 多量子阱中的子带间跃迁[81], 并从实验上研究了极化电场对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的影响[82]。3nm $\text{Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}/3\text{nm GaN}$ 和 3nm $\text{Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}/6\text{nm}$

GaN 的多量子阱是用 MOCVD 生长的。他们发现当量子阱比较宽时,极化电场会使有效量子阱宽变窄,从而使子带间跃迁波长变短,同时使子带间弛豫时间变长;当量子阱比较窄时,极化电场会使有效势垒层变低,从而影响第二子带的形成,使得子带间跃迁波长变长。在该实验中得到的子带间跃迁波长在 $2.9\sim 4.0\mu\text{m}$ 范围内。2000 年 Ng 等人用 MBE 生长得到了高质量的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 超晶格,它具有突变的界面,其薄膜层具有非常良好的均匀性[83]。在超晶格中的子带间跃迁波长位于 $1.52\sim 4.2\mu\text{m}$ 范围内。2002 年 Kishino 等人利用 rf-MBE 在蓝宝石衬底上生长得到了 90 个周期的 AlN/GaN 多量子阱,其势垒层和势阱层厚度分别为 11 个分子层和 4~8 个分子层[84]。其子带间跃迁的波长处于 $1.15\sim 1.55\mu\text{m}$ 范围内,它覆盖了整个光纤通信波段。同年他们利用 3.3 分子层量子阱的 AlN/GaN 超晶格获得了 $1.08\mu\text{m}$ 的子带间跃迁波长[85],这个波长是迄今为止从实验上在 AlN/GaN 量子阱中所获的最短的子带间跃迁波长,它非常接近 AlN/GaN 量子阱中子带间跃迁波长的理论预测值。随着量子阱厚度的增加,其子带间跃迁波长单调地增加。一般来说,MBE 比较容易实现单原子层控制,从而可以生长出高质量的异质结构和量子阱结构,尤其是对于具有薄势阱和薄势垒层的多量子阱,MBE 更是显示出了它独有的优势。但是 MBE 用于生长 III 族氮化物时其速度较慢,对于外延层较厚的器件(如 LEDs、LDs)的生长时间过长,不能满足大规模生产的要求。MOCVD 的生长速率适中,产量比较高,特别适合于大规模工业生产,从而容易实现产品的商业化。但是与 MBE 相比,MOCVD 难于精确控制单原子层的生长,也相对比较难于获得优异的突变异质结构界面。随着技术的改进,用 MOCVD 生长的材料的质量也在不断提高。2003 年 Waki 用 MOCVD 生长了 200 个周期的 1.6nm $\text{AlN}/1.7\text{nm}$ GaN 多量子阱,并用 HRXRD、TEM、透射谱等多种表征手段对多量子阱的界面情况进行了研究,结果表明该量子阱具有非常良好的异质结构界面[86]。其量子阱中子带间跃迁波长可短至 $1.68\mu\text{m}$,吸收峰的半高宽约为 27meV 。

2001 年 Asano 测量了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的载流子弛豫时间,发现它在亚皮秒量级[87],载流子弛豫时间直接决定了基于子带间跃迁的全光学调制器的调制速度。Asano 还研究讨论了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的调制效率,从而证实了基于子带间跃迁的调制器的可行性。2004 年 Ishida 等人制造了利用极化场发射电子的子带间量子级联激光器[88]。该激光器工作于中红外和近红

外波段。同年, Iizuka 等人利用基于多量子阱中子带间跃迁的光学调制制造了脊形波导[89], 其响应速度可短至 0.36ps。

与其它材料的量子阱相比, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁尽管具有波长短, 弛豫时间短等优点。但是, 实现通信波段子带间跃迁的材料生长还仅仅限于 MBE, MBE 的生长速度极其缓慢, 不适于大规模的材料生长, 难于实现利用子带间跃迁工作的光电子器件的商业化。MOCVD 的生长速度快, 适宜于大规模的材料生长, 但是不能精确控制单原子层的生长, 生长的异质结构不够优异。用 MOCVD 生长的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的波长目前还达不到 1.3 和 1.55 μm 的要求, 其子带间跃迁波长最短为 1.68 μm 。因此, 为了获得光纤通信波段的波长, 生长质量更好的、突变异质结构的、高 Al 组份的、阱宽更窄的量子阱成为目前实验上需要解决的问题。

为了实现激光器所必须的粒子数反转、光开关、双色探测器等, 三能级和四能级系统是必须的[90]。在 GaAs 系统中, 通常用台阶状量子阱或者耦合双量子阱中的子能级来实现三能级和四能级系统, 利用 GaAs 基台阶状量子阱或者耦合双量子阱中子带间跃迁已经实现了工作于中红外的超快双色光电子器件[91,92]。在 GaN 系统中, 2005 年 Li 等人利用薛定谔方程和泊松方程自治求解的方法从理论上研究了 GaN 基台阶状量子阱中子带间跃迁[93]。与台阶状量子阱相比, 获得同样波长的子带间跃迁, 双量子阱对势垒层中 Al 组份的要求没有台阶状量子阱那么高, 这将降低材料生长的难度。其次是三能级或四能级系统的台阶状量子阱很难获得两个吸收系数差不多的子带间跃迁, 而三能级或四能级系统的双量子阱却很容易获得两个吸收系数差不多的子带间跃迁, 而且还可以任意调整两个子带间跃迁吸收系数的相对大小。与 GaAs 系统相比, GaN 系统具有大的极化场, 这将对双量子阱中子带间跃迁产生很大的影响。极化场使得双量子阱的两个量子阱之间出现一个不可忽略的电势差, 从而使得两个量子阱中的子带具有不同的能量, 子带之间不再发生共振隧穿, 这将严重影响这两个量子阱中子带之间的跃迁概率。

1.4 本论文的主要工作

本论文主要对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱中子带间跃迁进行了系统的研究。

全文一共分为六章。第一章主要介绍了 GaN 基材料的一些基本性质，以及和其它化合物半导体材料相比，GaN 基量子阱中子带间跃迁的优势，还介绍了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的研究发展历程和最新进展。第二章主要介绍了理论计算的方法。该论文采用的是薛定谔方程和泊松方程的自洽求解。第三章主要研究了极化场对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁波长和吸收系数以及载流子分布的影响。由于极化场的存在，GaN 基双量子阱的各个结构参数对子带结构和子带间跃迁的影响也和 GaAs 基双量子阱不同。因此本章也研究了 GaN 基双量子阱的各个结构参数对子带间跃迁和载流子分布的影响。第四章主要研究了极化场及双量子阱的各个参数对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间的反交叉现象的影响。反交叉间隙可以用来衡量双量子阱的两个量子阱之间的耦合程度。第五章以设计三能级或四能级系统的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱为目标设计了双量子阱。在双量子阱中得到的三能级或四能级系统与阶梯形量子阱相比具有如下优点：工作于光纤通信波段的子带间跃迁比较容易实现；可以自由选择实现三能级系统或四能级系统；由于子带对之间的能量间隔可控制，而且比阶梯形量子阱中的二、三能级之间的能量间隔小，因此，基于双量子阱中子带间跃迁的光开关的转换速度比基于阶梯形量子阱中子带间跃迁的光开关快；双量子阱中子带间跃迁的两个吸收系数的相对大小可以自由的控制，易于实现粒子数反转。

第二章 计算方法和计算模型

2.1 薛定谔方程和泊松方程的自洽求解

在半导体材料中, 电势分布会影响载流子分布, 而载流子分布又会反过来影响电势分布。对于一个具体的半导体结构而言, 这两个影响是相互制衡的, 以至最终这两个影响将会达到平衡。电势分布对载流子分布的影响主要是通过薛定谔方程来体现的, 而载流子分布对电势分布的影响则是通过泊松方程来体现的。因此, 对于一个具体的半导体结构, 薛定谔方程和泊松方程的解必须自洽。本文研究的主要方法是薛定谔方程和泊松方程的自洽求解。

在半导体异质结构或量子阱结构中, 如果平行于量子阱方向的材料是均匀的, 垂直于量子阱方向的材料是由多层外延层所组成的, 则我们在自洽计算中可以仅仅只考虑垂直于量子阱方向的自洽计算。因此, 三维薛定谔方程和三维泊松方程的自洽求解简化为一维薛定谔方程和一维泊松方程的自洽求解。

1.1.1 薛定谔方程

一维单电子薛定谔方程可以表示为[94-96]:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi_i(z) \right) + (V(z) + e\phi_H(z) + V_{xc}(z)) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z), \quad (12)$$

这里 $\hbar$ 为约化普朗克常数, 它等于普朗克常数除以 2π ; z 为沿 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱的生长方向, 即垂直于量子阱平面的空间坐标; $m^*(z)$ 为有效质量, 它依赖于 z 方向的位置, 主要由 z 位置处的Al组份决定; E_i 为第 i 子带的本征能量; ψ_i 为第 i 子带的本征波函数; $V(z)$ 是由 z 位置处的Al组份决定的势能, 它在计算过程中主要用导带偏移来描述; $\phi_H(z)$ 是与静电相互作用有关的Hartree势, 它可以通过泊松方程来确定; $V_{xc}(z)$ 是交换关联势。

Alloys	[0001]		
	m_e^*	m_{lh}^*	m_{hh}^*
GaN	0.186	0.153	1.895
Al _{0.25} Ga _{0.75} N	0.223	0.181	2.430
Al _{0.50} Ga _{0.50} N	0.267	0.285	2.711
Al _{0.75} Ga _{0.25} N	0.268	0.231	3.752
AlN	0.305	0.252	4.289

Reference[97].

表 4. Al_xGa_{1-x}N 合金的电子有效质量(m_e^*)、轻空穴有效质量(m_{lh}^*)和重空穴有效质量

(m_{hh}^*)。

对于GaN、AlN和Al组份为0.25、0.50、0.75的Al_xGa_{1-x}N三元合金，电子有效质量、轻空穴有效质量和重空穴有效质量可由表4给出，对于其它任意Al组份的情况，其有效质量可根据表4的数据模拟得到。对任意Al组份Al_xGa_{1-x}N合金的电子有效质量可以表示成如下式子：

$$\begin{aligned}
 m_e^*(x) &= m_0(0.5541x^6 - 0.8750x^4 + 0.3717x^2 + 0.0682x + 0.1860), \text{ 当 } x \leq 0.5 \text{ 时;} \\
 m_e^*(x) &= m_0(0.0411x^{10} - 0.0041x^2 + 0.2680), \quad \text{当 } 0.5 < x \leq 0.75 \text{ 时;} \\
 m_e^*(x) &= m_0(0.2880x^2 - 0.3560x + 0.3730), \quad \text{当 } 0.75 < x \leq 1 \text{ 时.} \quad (13)
 \end{aligned}$$

其中 x 表示Al_xGa_{1-x}N合金中所含的Al组份，它的值处于0到1之间。对任意Al组份Al_xGa_{1-x}N合金的轻空穴有效质量可以表示成如下式子：

$$\begin{aligned}
 m_{lh}^*(x) &= m_0(-0.0053x^3 - 0.0107x^2 + 0.115x + 0.153), \text{ 当 } x \leq 0.25 \text{ 或 } x > 0.75 \text{ 时;} \\
 m_{lh}^*(x) &= m_0(4.9813x^4 - 9.968x^3 + 5.9047x^2 - 0.819x + 0.153), \\
 &\quad \text{当 } 0.25 < x \leq 0.75 \text{ 时.} \quad (14)
 \end{aligned}$$

对任意Al组份Al_xGa_{1-x}N合金的重空穴有效质量可以表示成如下式子：

$$\begin{aligned}
 m_{hh}^*(x) &= m_0(-10.083x^6 + 16.6635x^4 - 8.1013x^2 + 3.9148x + 1.895), \text{ 当 } x \leq 0.5 \text{ 时;} \\
 m_{hh}^*(x) &= m_0(-24.2987x^4 + 47.264x^3 - 26.8493x^2 + 6.278x + 1.895), \text{ 当 } x > 0.5 \text{ 时.}
 \end{aligned}$$

(15)

GaN和AlN的禁带宽度分别为3.4eV和6.2 eV，而 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的禁带宽度为[98]：

$$E_g(x) = xE_g(\text{AlN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - x(1-x), \quad (16)$$

其中导带偏移(ΔE_c)是总的能带偏移(ΔE_g)的70%[35,36]。在计算中我们将量子阱的最低点定义为0参考能量。

2.1.2 泊松方程

一维泊松方程可以表示为如下公式[99,100]：

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_0 \epsilon \frac{d}{dz} \phi_H(z) \right) = -e \left(N_D^+(z) - n_{2D}(z) - n_{3D}(z) \right), \quad (17)$$

其中 ϵ_0 是真空介电常数； ϵ 是相对介电常数； e 是一个电子所带的电量； $N_D^+(z)$ 是离化杂质浓度； $n_{2D}(z)$ 为所有子带中二维电子浓度的总和（在计算中其量纲已换算成三维电子浓度的量纲）； $n_{3D}(z)$ 是三维电子浓度。

GaN和AlN的相对介电常数分别为9.5和9.0。对任意Al组份 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的相对介电常数可以通过Vegard定律得到：

$$\epsilon(x) = 9.5(1-x) + 9.0x. \quad (18)$$

离化施主杂质浓度 $N_D^+(z)$ 、总的二维电子浓度 $n_{2D}(z)$ [101]、三维电子浓度 $n_{3D}(z)$ 分别可以表示为以下式子：

$$N_D^+ = N_D \left[1 - \frac{1}{1 + 1/2 \exp((E_D - E_f)/KT)} \right], \quad (19)$$

$$n_{2D}(z) = \sum_i n_{2D,i} |\psi_i(z)|^2 = \sum_i \frac{m^* KT}{\pi \eta^2} |\psi_i(z)|^2 \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_i}{KT} \right) \right], \quad (20)$$

$$n_{3D}(z) = N_C(z) F_{1/2} \left(\frac{E_f - E_i}{KT} \right), \quad (21)$$

其中 N_D 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和GaN中施主的掺杂浓度； E_D 是施主能级的能量，它被定为在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 和GaN导带底以下0.03eV处； E_f 是费米能级； K 是玻耳兹曼常数； $n_{2D,i}$ 是

第*i*个子带上的二维电子浓度； $N(z)$ 是导带的有效态密度，它可以表示为

$N_c(z) = 2 \left(\frac{2m^*KT}{4\pi\eta^2} \right)^{1/2}$ ； $F_{1/2} \left(\frac{E_f - E_i}{KT} \right)$ 是1/2阶费米-狄拉克积分。第*i*个子带上的

的二维电子浓度和1/2阶费米-狄拉克积分的表达式分别为：

$$n_{2D_i} = \int_{E_i}^{\infty} \rho(E) f(E) dE = \int_{E_i}^{\infty} \frac{m^*}{\pi\eta^2} f(E) dE = \frac{m^*KT}{\pi\eta^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_i}{KT} \right) \right], \quad (22)$$

$$F_{1/2} \left(\frac{E_f - E_i}{KT} \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{z^{1/2}}{1 + \exp \left(z - (E_f - E_i)/KT \right)} dz, \quad (23)$$

这里 $\rho(E)$ 是二维态密度，它是 $\frac{m^*}{\pi\eta^2}$ 并且与能量无关； $f(E)$ 是费米分布函数，它可以表示为：

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/KT} + 1}, \quad (24)$$

费米-狄拉克积分的计算非常复杂。数值计算主要由计算工具的性能和计算方法效率的总和，因此，计算速度的提高依赖于这两个因素。例如：有人统计过，在1955年至1975年的二十年间，计算机的速度提高了约数千倍，而同一时间内的数值计算效率竟提高了100万倍，这说明选择好的计算方法对提高计算速度，在某种意义上来说比提高计算机速度更重要，因为计算方法的改进所付出的代价比计算机硬件设备的改进所付出的代价要小得多。在本文中我们采用了以下近似[102]：

$$F_j \left(\frac{E_f - E_i}{KT} \right) \approx \left[\frac{(j+1)2^{j+1}}{\left[b + \frac{E_f - E_i}{KT} + \left(\left| \frac{E_f - E_i}{KT} - b \right|^c + a^c \right)^{1/c} \right]^{j+1}} + \frac{\exp \left(-\frac{E_f - E_i}{KT} \right)}{\Gamma(j+1)} \right]^{-1} \quad (25)$$

其中 a 、 b 、 c 可以表示为：

$$a = [1 + 3.75(j+1) + 0.025(j+1)^2]^{1/2},$$

$$b = 1.8 + 0.61j,$$

$$c = 2 + (2 - \sqrt{2})2^{-j}, \quad j = 1/2,$$

采用这种近似最大误差不超过0.6%，这足以保证数值模拟的精确性。

2.1.3 交换关联势

在我们的计算中近似使用了一维单电子薛定谔方程。但是，实际的半导体系统是一个多电子系统，因此，我们必须考虑到泡利不相容原理。而且半导体中的电子密度远远小于金属中的电子密度，这使得屏蔽效应不足以屏蔽电子之间的库伦相互作用，各个电子之间的行为不再相互独立，电子之间的行为将相互影响、相互关联，因而电子之间的库仑相互作用必须考虑。由泡利不相容原理决定的相互作用将产生的交换势，一个给定的电子对整个电荷分布的影响将产生关联势[103]。为了补偿单电子近似所带来的误差，我们在薛定谔方程的电势项中加入了交换关联势。交换关联势 $V_{xc}(z)$ 可以表示为[104]：

$$V_{xc}(z) = -0.985 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} n^{1/3}(z) \left[1 + \frac{0.034}{a_B^* n^{1/3}(z)} \ln[1 + 18.376 a_B^* n^{1/3}(z)] \right], \quad (26)$$

其中 $n(z)$ 为二维电子浓度 $n_{2D}(z)$ 和三维电子浓度 $n_{3D}(z)$ 之和； a_B^* 波尔半径，它可以表示为 $a_B^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2 / m^*e^2$ 。

2.2 极化场不连续

在泊松方程右边的表达式中，没有包含极化电荷，事实上极化电荷也将引起静电势。对于均匀的 $Al_xGa_{1-x}N$ 或GaN外延层，其体内是不存在极化电荷的，极化电荷存在于材料的表面。对于多层结构的 $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ 量子阱，极化电荷出现在异质界面处，它将在各个异质界面处引起一个极化场不连续。在本文中为了计算方便，将 $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ 界面处的极化场不连续作为模拟参数[105]。

$Al_xGa_{1-x}N$ 外延层或GaN外延层中总的极化场 $P(x)$ 为自发极化场 $P_{SP}(x)$ 和压电极化场 $P_{PE}(x)$ 之和：

$$P(x) = P_{SP}(x) + P_{PE}(x). \quad (27)$$

其中GaN和AlN的自发极化分别为 -0.029 C/m^2 和 -0.081 C/m^2 ，对任意Al组份 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的自发极化可以通过Vegard定律得到：

$$P_{sp}(x) = -0.052x - 0.029 \text{ C/m}^2. \quad (28)$$

对于沿[0001]方向外延生长的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ，在小应变的情况下，垂直于量子阱层方向的任意Al组份 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金中的压电极化可由下面的式子决定：

$$P_{PE}(x) = 2 \frac{a - a_0(x)}{a_0(x)} \left[e_{31}(x) - e_{33}(x) \frac{C_{13}(x)}{C_{33}(x)} \right]. \quad (29)$$

在这里我们假设GaN为缓冲层，它具有微米量级的厚度，比 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 外延层或GaN外延层($\sim \text{nm}$)厚得多。因此，我们可以近似的认为缓冲层的GaN不会发生应变，并且在共度生长的外延层中， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 外延层或GaN外延层和缓冲层的GaN具有相同的晶格常数。也就是说，我们可以认为GaN外延层没有发生应变，而 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 外延层发生应变， $P_{PE}(x)$ 仅仅存在于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 外延层中。上式中 a_0 表示材料没有发生应变时的晶格常数， a 表示共度生长的应变外延层的晶格常数，在缓冲层是GaN的情况下，我们可以近似的认为 a 就是没有发生应变时的GaN的晶格常数。未应变GaN和AlN的晶格常数分别为 0.3189 nm 和 0.3112 nm ，对任意Al组份未应变的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的晶格常数可以通过Vegard定律得到：

$$a_0(x) = -0.0077x + 0.3189 \text{ nm}. \quad (30)$$

GaN的压电常数 e_{31} 和AlN的压电常数 e_{31} 分别为 -0.49 C/m^2 和 -0.60 C/m^2 ，GaN的压电常数 e_{33} 和AlN的压电常数 e_{33} 分别为 0.73 C/m^2 和 1.46 C/m^2 ，对任意Al组份的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的压电常数 $e_{31}(x)$ 和压电常数 $e_{33}(x)$ 分别可以通过Vegard定律得到：

$$e_{31}(x) = (-0.11x - 0.49) \text{ C/m}^2, \quad (31)$$

$$e_{33}(x) = (0.73x + 0.73) \text{ C/m}^2. \quad (32)$$

GaN的弹性常数 C_{13} 和AlN的弹性常数 C_{13} 分别为 103 GPa 和 108 GPa ，GaN的弹性常数 C_{33} 和AlN的弹性常数 C_{33} 分别为 405 GPa 和 373 GPa ，对任意Al组份的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的弹性常数 $C_{13}(x)$ 和弹性常数 $C_{33}(x)$ 分别可以通过Vegard定律得到：

$$C_{13}(x) = (5x + 103) \text{ GPa}, \quad (33)$$

$$C_{33}(x) = (-32x + 405) \text{ GPa}. \quad (34)$$

因此，我们可以将各个界面处的极化场不连续表示成外延层Al组份的函数，极化场不连续可以表示为：

$$\Delta P_1 = P(x_{lw}) - P(x_{bb}), \quad (35)$$

$$\Delta P_2 = P(x_{cb}) - P(x_{lw}), \quad (36)$$

$$\Delta P_3 = P(x_{rw}) - P(x_{cb}), \quad (37)$$

$$\Delta P_4 = P(x_{bb}) - P(x_{rw}), \quad (38)$$

其中 ΔP_1 是体势垒层和左边量子阱之间界面处的极化场不连续； ΔP_2 是左边量子阱和中间耦合势垒层之间界面处的极化场不连续； ΔP_3 是中间耦合势垒层和右边量子阱之间界面处的极化场不连续； ΔP_4 是右边量子阱和体势垒层之间界面处的极化场不连续； x_{bb} 表示体势垒层的Al组份； x_{lw} 表示左边量子阱的Al组份； x_{cb} 表示中间耦合势垒层的Al组份； x_{rw} 表示右边量子阱的Al组份。

另一方面各个界面处的极化场不连续和各个外延层中的极化感应电场的关系可以表示为：

$$\Delta P_1 = \varepsilon_0(\varepsilon_{lw} - 1)F_{lw} - \varepsilon_0(\varepsilon_{bb} - 1)F_{bb}, \quad (39)$$

$$\Delta P_2 = \varepsilon_0(\varepsilon_{cb} - 1)F_{cb} - \varepsilon_0(\varepsilon_{lw} - 1)F_{lw}, \quad (40)$$

$$\Delta P_3 = \varepsilon_0(\varepsilon_{rw} - 1)F_{rw} - \varepsilon_0(\varepsilon_{cb} - 1)F_{cb}, \quad (41)$$

$$\Delta P_4 = \varepsilon_0(\varepsilon_{bb} - 1)F_{bb} - \varepsilon_0(\varepsilon_{rw} - 1)F_{rw}, \quad (42)$$

其中 ε_{bb} 为体势垒层中的相对介电常数； ε_{lw} 为左边量子阱中的相对介电常数； ε_{cb} 为中间耦合势垒层中的相对介电常数； ε_{rw} 为右边量子阱中的相对介电常数； F_{bb} 为体势垒层中的极化感应电场； F_{lw} 为左边量子阱中的极化感应电场； F_{cb} 为中间耦合势垒层中的极化感应电场； F_{rw} 为右边量子阱中的极化感应电场。另外，在计算中我们采用了周期性边界条件，即一个周期双量子阱的电势降落为0，因此有以下式子成立：

$$F_{bb}l_{bb} + F_{lw}l_{lw} + F_{cb}l_{cb} + F_{rw}l_{rw} = 0, \quad (43)$$

其中 l_{bb} ($=10\text{nm}$) 为体势垒层的厚度； l_{lw} 为左边量子阱的厚度； l_{cb} 为中间耦合势垒层的厚度； l_{rw} 为右边量子阱的厚度。由上面的几个式子我们可以用极化场不连续将薄膜中的极化感应电场表示出来：

$$F_{bb} = -\frac{(\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{hw} + \varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{cb} + \varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{rw})\Delta P_1 + (\varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{cb} + \varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{rw})\Delta P_2 + \varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{rw}\Delta P_3}{\varepsilon_0(\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{bb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{hw} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{cb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{rw})}, \quad (44)$$

$$F_{hw} = \frac{\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{bb}\Delta P_1 - (\varepsilon_{bb}\varepsilon_{rw}l_{cb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}l_{hw})\Delta P_2 - \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}l_{rw}\Delta P_3}{\varepsilon_0(\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{bb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{hw} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{cb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{rw})}, \quad (45)$$

$$F_{cb} = \frac{\varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{bb}\Delta P_1 + (\varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{bb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{rw}l_{hw})\Delta P_2 - \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}l_{rw}\Delta P_3}{\varepsilon_0(\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{bb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{hw} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{cb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{rw})}, \quad (46)$$

$$F_{rw} = \frac{\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{bb}\Delta P_1 + (\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{bb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}l_{hw})\Delta P_2 + (\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{bb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}l_{hw} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}l_{cb})\Delta P_3}{\varepsilon_0(\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{bb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{cb}\varepsilon_{rw}l_{hw} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{rw}l_{cb} + \varepsilon_{bb}\varepsilon_{hw}\varepsilon_{cb}l_{rw})}. \quad (47)$$

2.3 薛定谔方程和泊松方程自洽求解的程序

在自洽求解过程中，首先设定一个形如方势阱的电势分布，根据给定的电势分布数值求解薛定谔方程得到 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的能级和与其对应的波函数。再设定一个费米能级，根据费米分布函数、量子阱中的能级和波函数求得二维电子分布，同时求得离化杂质分布和三维电子分布，从而得到总的电荷分布。在求解电荷分布的过程中，费米能级和电荷分布必须自洽以满足电荷中性条件。再根据电荷分布由泊松方程求得一个新的电势分布，同时要求 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱必须满足周期性边界条件。最后将新的电势分布代入旧的电势分布重新求解薛定谔方程，为了防止新的电势分布振荡或新的电势分布不收敛，将新旧电势分布按一定的百分比重新组合后再代入旧的电势分布[106]，如此循环的求解，直到薛定谔方程和泊松方程的解自洽为止。本文自洽计算的流程图表示在图7中：

我们数值求解所用的方法是差分法，它是各种数值方法中应用最广、最成熟的方法。差分法的实质就是以差分代替微分，以差商代替微商，它的基础是泰勒展开。对函数 $f(y)$ ，其一阶微商化成一阶差商后：

$$\frac{df(y)}{dy} = \frac{f(y+h) - f(y)}{h}, \quad (48)$$

其中， y 为自变量， h 为数值计算的步长。二阶微商可以先化为一阶微商后再利用上面的式子：

$$\frac{d^2 f(y)}{dy^2} = \frac{d}{dy} \left(\frac{df(y)}{dy} \right) = \frac{dp(y)}{dy}, \quad (49)$$

其中 $p(y) = \frac{df(y)}{dy}$, 这样二阶微商 $\frac{d^2 f(y)}{dy^2}$ 就化成了两个一阶微商 $\frac{dp(y)}{dy}$ 和 $\frac{df(y)}{dy}$ 。

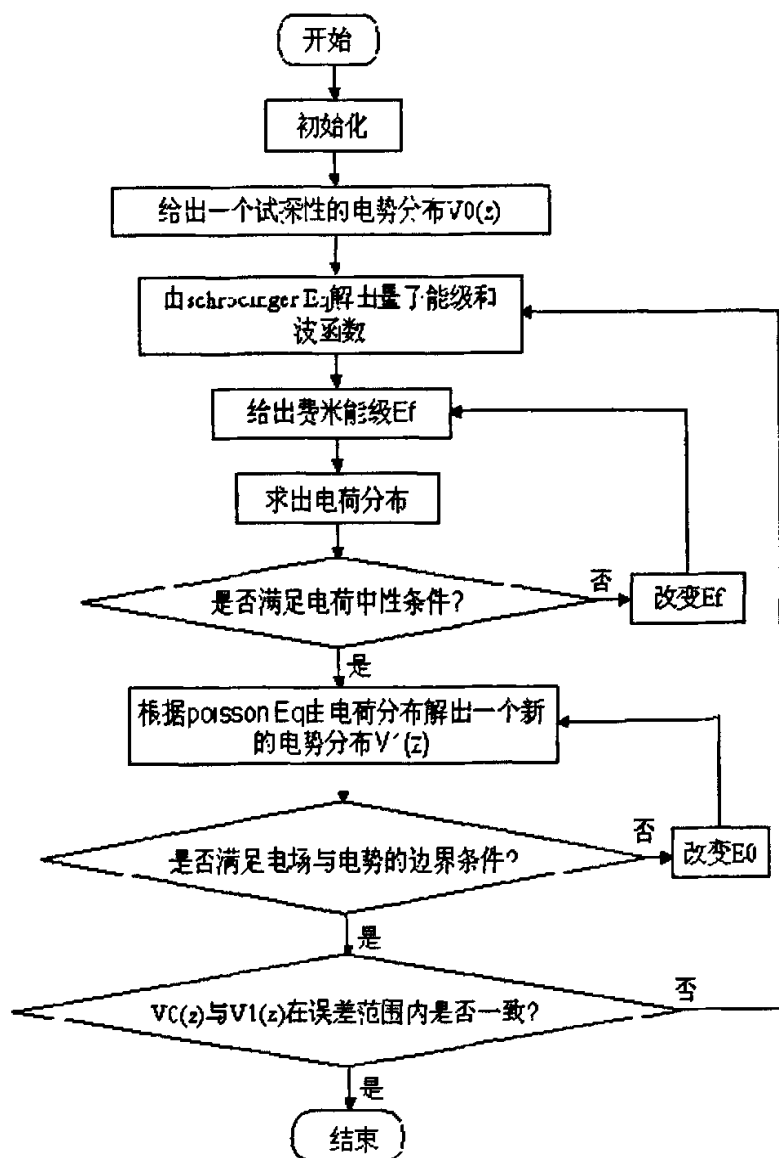


图 7 自洽求解薛定谔方程和泊松方程的流程图。

2.4 子带间跃迁光学吸收系数的计算

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中,子带间跃迁的光学吸收系数可以表示为三部分乘积的形式,这三部分分别为振子强度、初态和末态之间载流子占据数之差和洛伦兹线形函数。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带之间的光学吸收系数的表达式为[107,108]:

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{w} \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon}} \sum_{m>n} |M_{mn}|^2 \times \frac{(N_n - N_m)(\eta/\tau)}{(E_m - E_n - \eta\omega)^2 - (\eta/\tau)^2}, \quad (50)$$

这里 ω 是入射光的频率; μ_0 是真空磁导率; w 为总的量子阱宽度; τ 为消相干时间; M_{mn} 为 m 、 n 子带间跃迁的偶极矩阵元。在我们的计算中 τ 被设为0.14 皮秒[109]。 M_{mn} 可由下列式子给出:

$$M_{mn} = \int_{-w/2}^{w/2} \psi_m^*(z) e|z \psi_n(z) dz, \quad (51)$$

E_n 和 E_m 分别表示参与子带间跃迁的初态和末态的本征能量; ψ_n 和 ψ_m 分别表示参与子带间跃迁的初态和末态的本征函数; N_n 和 N_m 分别表示初态和末态上的载流子占据数。在这里 $N_i(i=m, n)$ 可表示为:

$$N_i = \int n_{2D-i} |\Psi(z)|^2 dz. \quad (52)$$

由于 $\frac{\eta}{\tau}$ 处于 10^{-3} eV量级,从(50)式中我们看到,只要 $\eta\omega$ 稍稍偏离 $E_m - E_n$,吸收系数就为0,仅当 $\eta\omega = E_m - E_n$ 时才发生共振吸收。根据费米分布函数,子带上载流子占据的概率随 $\frac{E_i - E_f}{KT}$ 的增加呈指数减小,因而在量子阱中基态上的载流子占据数将远远小于激发态上的载流子占据数。另外,振子强度正比于子带间跃迁的偶极矩阵元的平方,从(51)式我们看到,当初末态波函数同为奇函数或同为偶函数时,积分为0,也就是说振子强度为0,此时的跃迁被禁止;当初末态波函数中的一个波函数为奇函数,另一个波函数为偶函数时,积分不为0,此时的跃迁是允许的;当初末态波函数不具有奇偶对称性,并且在空间上重叠时,跃迁是允许的,波函数的重叠将影响吸收系数的大小,波函数在空间上不重叠,也就谈不上任何吸收的发生。因此,子带间跃迁的光学吸收系数主要由基态上的载流子占据数、初末态波函数的重叠和洛伦兹线形函数决定。

2.5 计算模型

图8给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数的模平方，点A表示零参考能量。双量子阱的结构是10 nm $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.0$ nm $\text{GaN}/1$ nm $\text{Al}_{0.70}\text{Ga}_{0.30}\text{N}/2.0$ nm $\text{GaN}/10$ nm $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ 。势垒层和量子阱之间的极化场不连续是1.5 MV/cm，中间耦合势垒层和量子阱之间的极化场不连续是1.4 MV/cm， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒层中的掺杂浓度是 $5.0 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。尽管从结构上看，双量子阱的两个量子阱具有相同的阱宽和相同的阱深，但从图8中可以看出， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱具有不对称的导带结构和波函数分布，奇序子带波函数主要分布在左边量子阱中，偶序子带波函数主要分布在右边量子阱中。

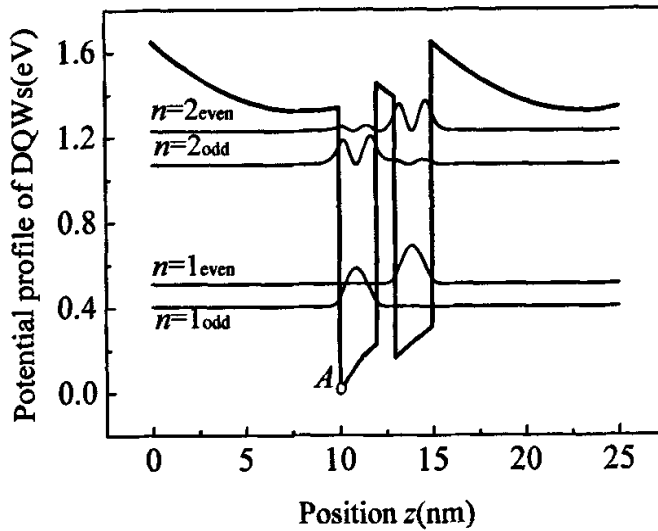


图8 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数的模平方，点A是能量参考点。

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒层和 GaN 势阱中的极化感应电场将导致电势降落 $\sum_i eF_i l_i$ 的出现，这里 e 表示一个电子所带的电量， F_i 表示极化感应电场， l_i 表示势垒层或势阱层的厚度，脚标 $i=bb, lw, cb, rw$ 。因此两个量子阱之间出现电势降落，从而使得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构变得不对称。如果将奇序子带看成是左边量子

阱的子带，偶序子带看成是右边量子阱的子带，双量子阱之间电势降落的出现将导致奇偶序子带之间Stark shift的出现，从而使得奇偶序子带对之间的共振被解除。这将减小左右量子阱中电子之间的相互隧穿。最终导致奇序子带波函数主要分布在左边量子阱中，偶序子带波函数主要分布在右边量子阱中。

本章小结

本章介绍了我们的研究方法、计算中参数的选取和计算模型。本文的研究方法主要是应用数值求解方法自洽求解了薛定谔方程和泊松方程。考虑到我们应用的是一维单电子薛定谔方程，而实际的半导体是一个多电子体系，并且半导体又不像金属那样具有大的自由电子密度，屏蔽效应不足以屏蔽电子之间的库仑相互作用，从而使得各个电子之间的行为不再可以近似认为是相互独立的。因而为了补偿求解单电子薛定谔方程所带来的误差，我们考虑了由泡利不相容原理和电子之间的库仑相互作用所引起的交换关联势。GaN基材料具有很大的自发极化和压电极化效应，它将在均匀外延层的表面和界面处产生密度高达 $10^{13}/\text{cm}^2$ 的极化电荷，从而在GaN基外延层内产生强度高达MV/cm的极化感应电场，使GaN基外延层的能带发生弯曲，本文为了计算方便，将表面或界面处的极化场不连续作为参数进行了数值计算。本章同时也给出了自洽求解的流程图和数值计算方法，我们所用的数值计算方法是应用最广最成熟的差分法。另外，本章也给出了子带间吸收系数的计算方法和计算中所用的参数，并分析了决定吸收系数的主要因素，决定吸收系数的三个因素是波函数在实空间的重叠，参与跃迁的子带中具有较低能量的子带上的载流子占据数和洛伦兹线形函数。除此之外，本章也给出了本文的计算模型，本文研究的GaN基材料的结构主要是耦合双量子阱。由于GaN基材料具有强的极化效应，双量子阱的两个量子阱之间将出现一个大的电势降落，因而GaN基双量子阱具有不对称的导带结构，不对称的波函数，并且奇序子带波函数主要分布在左边量子阱中，偶序子带波函数主要分布在右边量子阱中。

第三章 极化场及 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱结构参数对子带间跃迁的光学性质和电子分布的影响

3.1 引言

与传统的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 异质结构相比, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构具有大的带偏移、大的自发极化和压电极化效应、大的纵向光学声子能量等特点。使得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 材料具有与 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 系统不同的经典和量子行为。

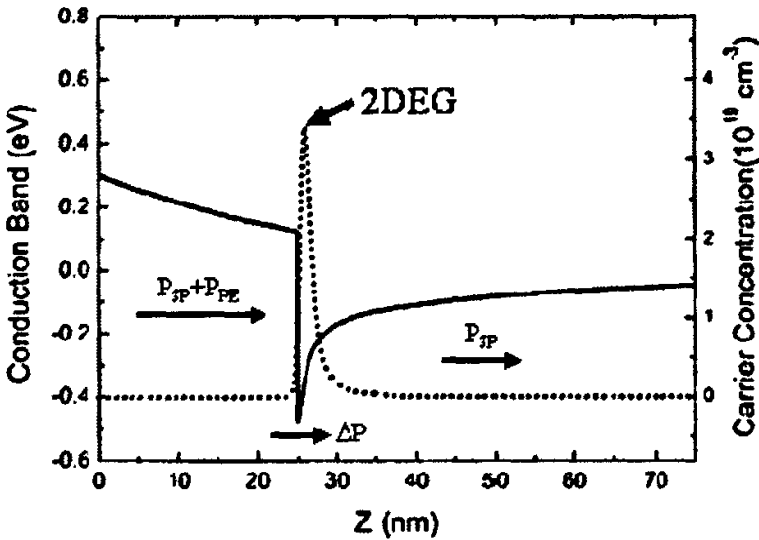


图9 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构的导带结构和电子分布图。

图9给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构的导带结构和电子分布图, 其中实线表示导带结构, 虚线表示电子分布图[110,111]。GaN基半导体外延层中存在大的极化效应, 极化效应会对外延层中的极化电荷和极化感应电场的分布有很大的影响。GaN基材料中的极化效应包括自发极化效应和压电极化效应。与传统的III-V族或II-VI族化合物半导体如ZnO相比, GaN或AlN的自发极化可比其大十倍以上, 由自发极化在外延层中引起的极化感应电场可达3MV/cm。另外, AlN外延层的自发极化是GaN

的2.8倍， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的自发极化随其Al组份的增加而增大。因此在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质界面处存在大的极化场不连续和极化电荷面密度。对于缓冲层是GaN的高质量全应变的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 外延层中具有大的压电极化效应，由压电效应在外延层中引起的极化感应电场可达 $2\text{MV}/\text{cm}$ ，而在异质界面处引起的极化电荷面密度比 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 高五倍以上。并且在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 外延层中压电极化效应和自发极化效应是相互加强的，这使得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质界面处的极化场不连续和极化电荷面密度进一步变大。这么大的极化场不连续可以造成异质界面处的既窄又深的三角势阱，这将有利的二维电子气的限制，使得异质界面处具有很高的二维电子气面密度(如图9所示)。即使在无人为有意掺杂的情况下，在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质界面处二维电子气面密度可高达 $2\times 10^{13}/\text{cm}^2$ ，远远超过其它III-V族化合物半导体，高的二维电子气面密度可以大大提高 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HFET等半导体电子器件的性能，也是制作许多实用的半导体电子器件的理论基础。

极化效应对基于带间跃迁的GaN基半导体材料的光学性质也有较大的影响[112]。与GaAs基材料相比，极化效应使得GaN基量子阱中带间跃迁的有效带隙宽度减小，从而增加了带间跃迁的波长，同时它会部分解除价带子带和导带子带的波函数在空间上的重叠。基于GaN基材料具有大的极化效应的特点，我们研究了极化场对双量子阱中子带间跃迁的影响，另外，由于极化场的出现，使得双量子阱的结构参数对子带间跃迁的影响也与没有极化场时平带情况的双量子阱有着显著的区别。

3.2 极化场的影响

图10给出了 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱导带结构和波函数的模平方，在这里所用的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的结构是 $10\text{nm Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.5\text{nm GaN}/1\text{nm Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.5\text{nm GaN}/10\text{nm Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ ，其势垒层掺杂浓度为 $5\times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。实线表示极化场不连续为0时的平带情况，方框表示其费米能级；虚线表示极化场不连续为 $2\text{MV}/\text{cm}$ 时的情况，圆圈表示其费米能级。耦合双量子阱的子带按能量从小到大依次为 1_{odd} 、 1_{even} 、 2_{odd} 、 2_{even} 子带。从图中可以看到，当没有极化场不连续的时

候，双量子阱的导带结构和波函数的模平方都是对称的，两个量子阱之间没有电势降落，每个子带波函数在两个量子阱中都有分布；当有极化场不连续的时候，双量子阱的导带结构和波函数的模平方不再具有对称性，两个量子阱之间出现一个电势降落，奇序子带波函数主要分布在左边量子阱中，偶序子带波函数主要分布在右边量子阱中，并且所有子带的位置都上升，偶序子带的位置上升的尤其多。

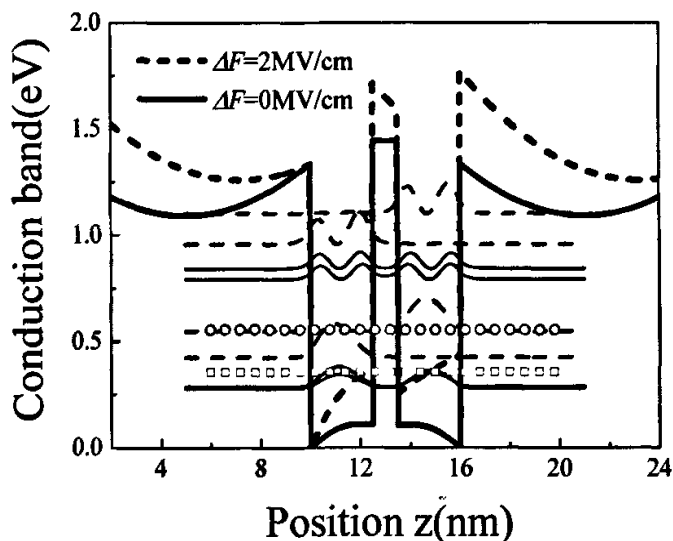


图10 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数的模平方。其中实线表示极化场不连续为0的情况，虚线表示极化场不连续为2MV/cm的情况，点表示费米能级。

从图10中可以看到，当没有极化场不连续的时候，如果势垒层掺杂浓度很小，导带是平带，并且势垒层掺杂浓度为 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ ，在室温的情况下，由于势垒层中杂质的离化、离化施主杂质和电子的分离（电子向势阱移动）将使得势垒层导带向下弯曲，势阱导带向上弯曲。但是无论势垒层中有无掺杂，当没有极化场不连续的时候， $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构是对称的，两个量子阱之间没有电势降落，由于子带之间的共振，波函数在两个量子阱中都有分布并且波函数的模平方是对称的，这将使得每个子带上所占据的电子在两个量子阱中的分布概率相同。当有极化场不连续的时候， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 势垒层和GaN势阱中的极化感应电场将导致电势降落 $\sum_i eF_i l_i$ 的出现，由极化感应电场引起的两个量子阱阱底之间的电势

降落为 $eF_{hw}l_{hw}+eF_{cb}l_{cb}$ 。如果假设每个子带上的电子分布在相应波函数的波峰处，由于每个子带波函数的波峰在两个量子阱中的相对位置几乎相同，则由极化感应电场引起的奇序子带和偶序子带之间的Stark shift可以被近似为由极化感应电场所引起的两个量子阱之间的电势降落。另外由于极化感应电场所引起的两个量子阱中相应的子带对之间（如基态子带对之间或激发态子带对之间）的Stark shift，从而使得子带对之间的共振被解除，此时子带的波函数主要分布在其中一个量子阱中，如图中虚线所示，这时我们可以认为奇序子带是左边量子阱中的子带，而偶序子带是右边量子阱中的子带。和没有极化场不连续时的 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱相比，有极化场不连续时左边量子阱阱底向上的弯曲比没有极化场不连续时大得多，由于奇序子带波函数的波峰位于量子阱的中央，因此左边量子阱中的奇序子带相对于没有极化场不连续时往上平移了约0.16eV；有极化场不连续时右边量子阱中的偶序子带相对于没有极化场不连续时平移了约0.26eV，而有极化场不连续时两个量子阱之间的电势降落也是0.26eV。

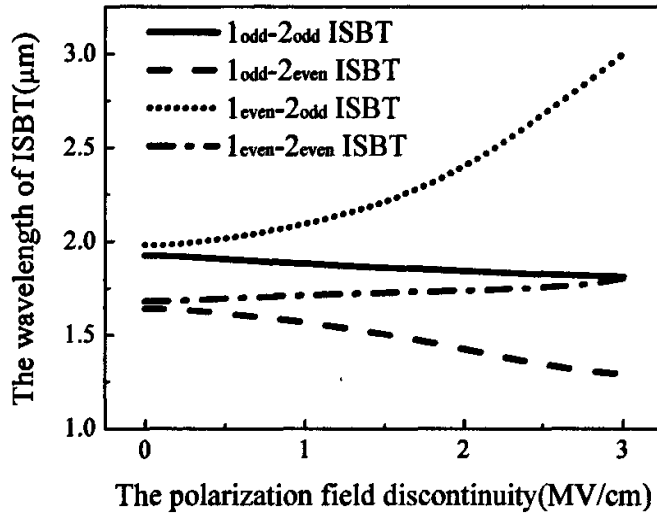


图 11 极化场不连续 ΔP 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁波长的影响。

图11给出了极化场不连续 $\Delta P(=\Delta P_1 = \Delta P_2 = \Delta P_3 = \Delta P_4)$ 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中从基态到激发态的子带间跃迁波长的影响， ΔP 的变化范围是从0到

3MV/cm, $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的计算结构和势垒层掺杂浓度与图10一致。从图中我们可以看到极化场不连续对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长的影响较为显著,而对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长的影响较小。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随极化场不连续的增加而变短, $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长随极化场不连续的增加而变长。

正如图10所显示的那样,当有极化场不连续时,由于量子阱中子带对之间发生Stark shift,子带对之间的能量间距变大以及它们之间的共振被解除,奇序子带波函数和偶序子带波函数分别主要分布在左边量子阱和右边量子阱中,因此奇序子带和偶序子带分别可以认为是左边量子阱和右边量子阱中的子带。由于在极化场不连续变化的过程中,势阱的宽度和阱深都没有变化,所以左边量子阱中奇序子带之间的相对位置和右边量子阱中偶序子带之间的相对位置也不会发生大的变化,因此极化场不连续对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长的影响较小;但是当极化场不连续变化的时候,它会使势垒层和势阱的导带发生弯曲,从而微小的改变量子阱的有效阱深,因此 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随极化场不连续的改变会有微小的变化。由于极化场不连续引起的两个量子阱之间的电势降落以及由此引起的子带对之间的Stark shift,基态和激发态偶序子带相对于相应的奇序子带向高能量方向平移,从而致使 1_{odd} 和 2_{even} 子带之间的能量间距变大, 1_{even} 和 2_{odd} 子带之间的能量间距变小(见图10)。因此, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随极化场不连续的增加而变短, $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长随极化场不连续的增加而变长。

图12给出了不同极化场不连续时, $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的电子分布,其计算结构和势垒层掺杂浓度与图10一致。实线表示极化场不连续为6MV/cm的情况,虚线表示极化场不连续为2MV/cm的情况,点画线表示没有极化场不连续的情况。从图中可以看到,对于没有极化场不连续的情况,电子在两个量子阱中的分布是对称的,而对于有极化场不连续的情况,电子在左边量子阱中的分布明显大于在右边量子阱中的分布。随着极化场不连续的增大,左边量子阱中电子浓度增加,而右边量子阱中电子浓度减小,同时两个量子阱中电子浓度的峰值都向左移。

$\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带上的电子浓度随子带和费米能级之间能量差的增大呈指数地减小。从图10中可以看到,激发态和基态之间的能量间距至少是

300meV，这个数值是常温下的KT (26meV) 十多倍。根据费米分布函数 (23式)，基态子带上的载流子占据数可以比激发态子带上的载流子占据数大 e^{10} 倍，从而对于基态子带来说，激发态子带上的载流子占据数可以忽略不计，因此我们可以说双量子阱中的电子浓度主要由其基态子带上的载流子占据数决定。电子的分布几率与子带波函数的模平方成正比，因此，子带波函数的模平方表示了在该子带上的电子浓度分布。对于没有极化场不连续的情况，双量子阱中所有子带的波函数分布都是对称的，也就是说它们在两个量子阱中都有相同的分布，由于电子浓度分布与波函数的模平方成正比，因而此时双量子阱中的电子浓度分布是对称的。

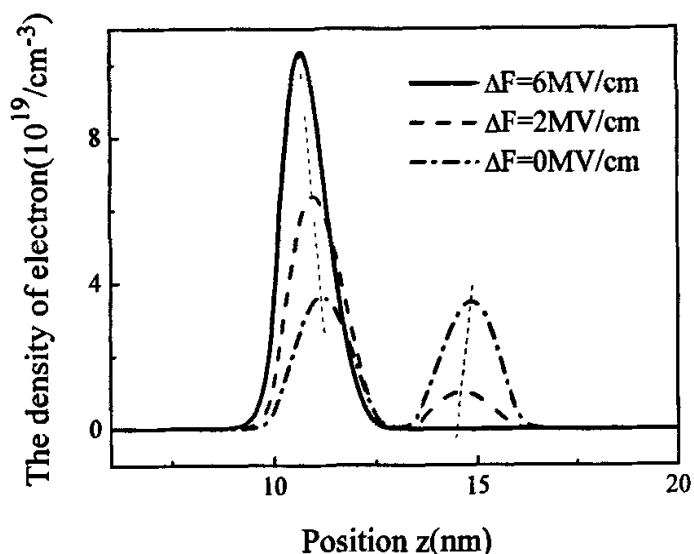


图 12 不同极化场不连续情况下， $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的电子分布。

对于有极化场不连续的情况，由于 1_{odd} 和 1_{even} 子带之间的共振被解除以及它们之间相对的Stark shift， 1_{odd} 子带波函数主要分布在左边量子阱中， 1_{even} 子带波函数主要分布在右边量子阱中，因此， 1_{odd} 子带上的电子主要分布在左边量子阱中， 1_{even} 子带上的电子主要分布在右边量子阱中。另外，由于 1_{odd} 子带的能量位置比 1_{even} 子带低，因此， 1_{odd} 子带上的电子比 1_{even} 子带多。当有极化场不连续的时候， 1_{odd} 子带和费米能级（如图10中圆圈所示）之间的能量差比没有极化场不连续时 1_{odd} 子带和费米能级（如图10中方框所示）之间的能量差小，而 1_{even} 子带和费米能级之间的能量

差比没有极化场不连续时 1_{even} 子带和费米能级之间的能量差大。由于子带上的电子浓度随该子带和费米能级之间能量差的增加而呈指数地减小， 1_{odd} 子带上的电子浓度随着极化场不连续的增加而增加，而 1_{even} 子带上的电子浓度随着极化场不连续的增加而减小。由于极化场不连续的存在， $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的阱底不再是平的，而是三角形的量子阱，对于左边量子阱的倾斜边，有极化场不连续时比没有极化场时的更陡，而对于右边量子阱的倾斜边，由起初的向左倾斜变为向右倾斜并随极化场不连续的增大而变陡（见图10），基态子带波函数的波峰移向左边，因此两个量子阱中电子浓度的波峰随着极化场的增大而移向左边。

图13给出了极化场不连续 ΔP_{bb} 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中从基态到激发态的子带间跃迁吸收系数的影响，界面处极化场不连续的变化范围是从0到3MV/cm， $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的计算结构、势垒层掺杂浓度与图10一致。从图中我们可以看到 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随极化场不连续的增大而减小， $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间吸收系数随极化场不连续的增大而增大，当极化场不连续小于0.7MV/cm时， $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间吸收系数随极化场不连续的增大而增大，当极化场不连续大于0.7MV/cm时， $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间吸收系数随极化场不连续的增大而减小。

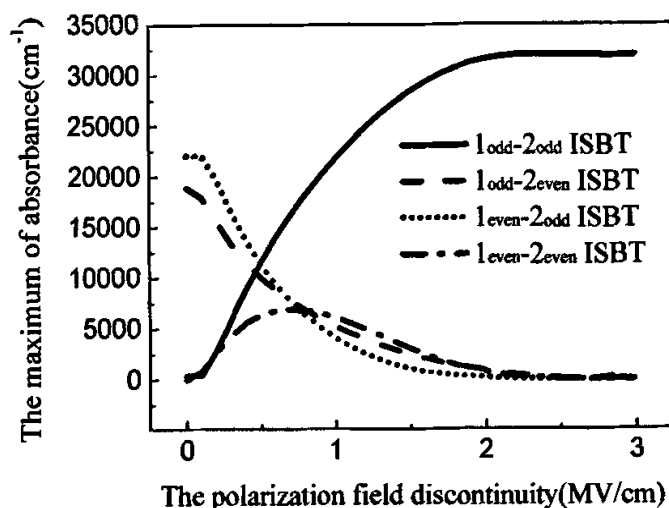


图 13 极化场不连续 ΔP 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁的吸收系数的影响。

随着极化场不连续的增大, $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带对之间的共振被解除, 子带的波函数不再在两个量子阱中都有分布, 奇序子带波函数逐渐变为主要分布在左边量子阱中, 偶序子带波函数逐渐变为主要分布在右边量子阱中。这样奇偶序子带之间波函数的重叠就随极化场不连续的增大而变小, 因此, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随极化场不连续的增大而减小。对于 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁, 决定其吸收系数的主要有波函数的重叠和基态子带上的载流子占据数。左边量子阱中奇序子带波函数之间和右边量子阱中偶序子带波函数之间的重叠随极化场的增大而增大 (如图10所示)。另外, 由上面所述可知, 1_{odd} 子带上的电子浓度随着极化场不连续的增加而增加, 而 1_{even} 子带上的电子浓度随着极化场不连续的增加而减小。对于 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁, 决定其吸收系数的两个因素波函数的重叠和基态子带 (1_{odd} 子带) 上的载流子占据数都随极化场不连续的增大而增大, 因此 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随极化场不连续的增大而增大; 对于 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁, 随着极化场不连续的增加, 决定其吸收系数的两个因素, 其中一个因素波函数的重叠增加, 另外一个因素基态子带上 (1_{even} 子带) 的载流子占据数减小。当极化场不连续小于 $0.7\text{MV}/\text{cm}$ 时, 1_{even} 和 2_{even} 子带波函数的重叠的增加是主要的, 因此, $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间吸收系数随极化场不连续的增大而增大; 当极化场不连续大于 $0.7\text{MV}/\text{cm}$ 时, 基态子带上 (1_{even} 子带) 的载流子占据数减小成为主要的因素, 因此, $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间吸收系数随极化场不连续的增大而减小。

3.3 中间耦合势垒层中 Al 组份的影响

图 14 给出了 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱导带结构和波函数的模平方, 在这里所用的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的结构是 $10\text{nm } \text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.5\text{nm } \text{GaN}/1\text{nm } \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/2.5\text{nm } \text{GaN}/10\text{nm } \text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$, 其体势垒层和势阱之间界面处的极化场不连续 $\Delta P_1 = \Delta P_4$ 为 $3\text{MV}/\text{cm}$, 在计算中我们假设各个势垒层外延层的弛豫程度是一样的, 势垒层掺杂浓度为 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。实线表示中间耦合势垒层中 Al 组份为 0.05 的情况; 虚线表示中间耦合势垒层中 Al 组份为 0.6 的情况。耦合双量子阱的子带按能量从小到大依次为 1_{odd} 、 1_{even} 、 2_{odd} 、 2_{even} 子带。从图中可以看到, 除了 1_{odd} 子带外, 当中间耦合势垒层中 Al 组份很小的时候, 其子带波函数在整个双量子阱

中都有分布, 当 Al 组份很大的时候, 其奇序子带波函数主要分布在左边量子阱中, 偶序子带波函数主要分布在右边量子阱中; 另外随着 Al 组份的增大, 两个量子阱之间的电势降落变小。

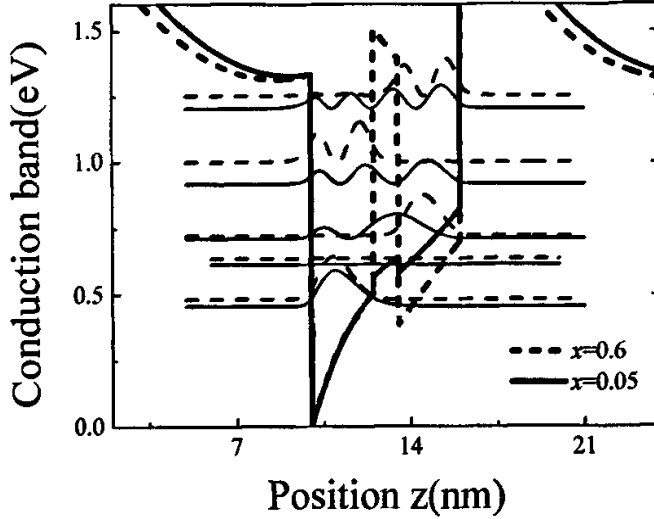


图 14 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数的模平方。其中实线和虚线分别表示中间耦合势垒层的 Al 组份 x 为 0.05 和 0.6 的情况。

中间耦合势垒层中 Al 组份 x 的变化将导致势垒层高度的变化, 同时也将导致势阱和中间耦合势垒层之间界面处极化场不连续 $\Delta P_2 = \Delta P_3$ 的变化。另外在计算中我们假设势垒层的弛豫程度保持不变, 因此 x 和 ΔP_2 的关系可以表示成:

$$\Delta P_2 = 3.42x + 0.8x^2 \text{ MV/cm.} \quad (53)$$

从 3.2 节中可知由极化感应电场引起的两个量子阱之间的电势降落为 $eF_{iw}l_{iw} + eF_{cb}l_{cb}$ 。另外, 势垒层中极化感应电场的方向和势阱中的极化感应电场的方向相反, 如果势阱中极化感应电场的方向为正, 则势垒层中极化感应电场的方向为负。当中间耦合势垒层中 Al 组份增加的时候, 其中的极化感应电场沿负向增大, 两个量子阱之间电势降落的表达式中的后一项也沿负向增大, 因此 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的两个量子阱之间的电势降落随中间耦合势垒层中 Al 组份的增加而减小 (如图 14 所示)。由于极化感应电场的出现致使量子阱的阱底

形成一个三角形的量子阱，当中间耦合势垒层中 Al 组份 x 很小的时候，第一奇序子带已经被限制在左边的三角形的量子阱中，因而中间耦合势垒层中 Al 组份 x 对第一奇序子带波函数的分布几乎没有影响。而中间耦合势垒层中 Al 组份 x 对其它几个子带波函数却有较强的影响，当 Al 组份 x 很小的时候，我们可以将双量子阱看成一个单量子阱，而这个单量子阱的子带波函数在整个量子阱中都有分布，随着 Al 组份的增加，中间耦合势垒层的增高，奇序子带波函数变成主要分布在左边量子阱中，偶序子带波函数变成主要分布在右边量子阱中（如图 14 所示）。

图 15 给出了中间耦合势垒层中 Al 组份 x 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁波长的影响，其中 Al 组份 x 的变化范围是从 0 到 0.75，其它参数如计算结构、界面处的极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图 14 一致。从图 14 中我们可以看到 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层中 Al 组份的增加而减小；而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随 Al 组份的增加呈非单调的关系，都是先随 Al 组份的增加而增加，后随 Al 组份的增加而减小。

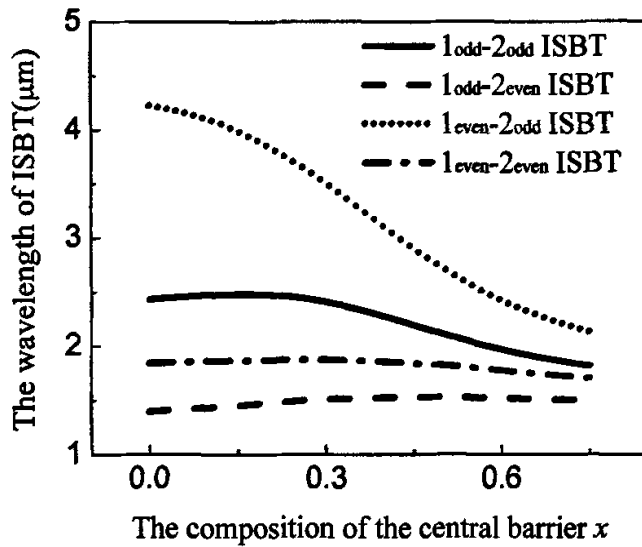


图 15 中间耦合势垒层的 Al 组份 x 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁波长的影响。

当中间耦合势垒层中 Al 组份 x 很小的时候，双量子阱可以被看成是单量子阱。

随着中间耦合势垒层中 Al 组份的增加, 单量子阱逐渐变成双量子阱, 其单量子阱的子带由第一、第二、第三、第四子带依次逐渐变成双量子阱的 1_{odd} 、 1_{even} 、 2_{odd} 、 2_{even} 子带。这样 1_{odd} 和 2_{odd} 子带的位置随着 Al 组份的增加而上升, 而 1_{even} 和 2_{even} 子带的位置随着 Al 组份的增加而下降。起初当 Al 组份很小的时候, 增加 Al 组份对位置较低的 1_{odd} 和 1_{even} 子带的影响较大, 而对 2_{odd} 和 2_{even} 子带的影响较小, 此时, 1_{odd} 子带的位置随 Al 组份的增加而上升, 1_{even} 子带的位置随 Al 组份的增加下降, 而 2_{odd} 和 2_{even} 子带的位置随 Al 组份的增加几乎不变, 因而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随 Al 组份的增加而增加, $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随 Al 组份的增加而减小。当 Al 组份较大的时候, 此时 1_{odd} 和 1_{even} 子带已经被限制在双量子阱中, 因而增加 Al 组份对位置较低的 1_{odd} 和 1_{even} 子带的影响很小, 而对 2_{odd} 和 2_{even} 子带的影响较大, 此时, 1_{odd} 和 1_{even} 子带的位置随 Al 组份的增加几乎不变, 而 2_{odd} 子带位置随 Al 组份的增加而上升, 2_{even} 子带位置随 Al 组份的增加而下降, 因此 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 随 Al 组份的增加而减小。单量子阱随着中间耦合势垒层中 Al 组份的增加逐渐变成双量子阱, 而双量子阱的每个量子阱都比单量子阱时候的阱宽窄, 因而所有子带位置应该都随 Al 组份的增加而上升, 尤其是 2_{odd} 和 2_{even} 子带的位置上升得更多, 因此, 所有的子带间跃迁波长包括 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随 Al 组份的增加而减小。综上所述, 当中间耦合势垒层中 Al 组份很小的时候, 我们所计算的量子阱可以被看成是单量子阱, 随着 Al 组份的增加, 该单量子阱逐渐变成双量子阱, 单量子阱的基态和第二子带 (第一激发态) 逐渐变成双量子阱的基态; 单量子阱的第三 (第二激发态) 和第四 (第三激发态) 逐渐变成双量子阱的激发态。另外, 变成双量子阱后, 其每个量子阱的宽度都小于原来的单量子阱的宽度。主要是以上两个因素导致 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层中 Al 组份的增加而减小, 而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随 Al 组份的增加呈非单调的关系。

图 16 给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层中 Al 组份不同的情况下的电子分布, 中间耦合势垒层中 Al 组份分别取 0.05、0.6、0.75, 其计算的结构、极化场不连续和势垒层掺杂浓度都和图 14 一致。从图中我们看到, 电子主要分布在左边量子阱中, 中间耦合势垒层中 Al 组份对电子浓度的影响不大, 左边量子阱中电子浓度的峰值随 Al 组份的增加而增大, 而且左边量子阱中电子分布的半高宽

随着 Al 组份的增加而减小，右边量子阱中电子浓度的峰值随 Al 组份的增加呈非单调的关系，它先增加后减小。

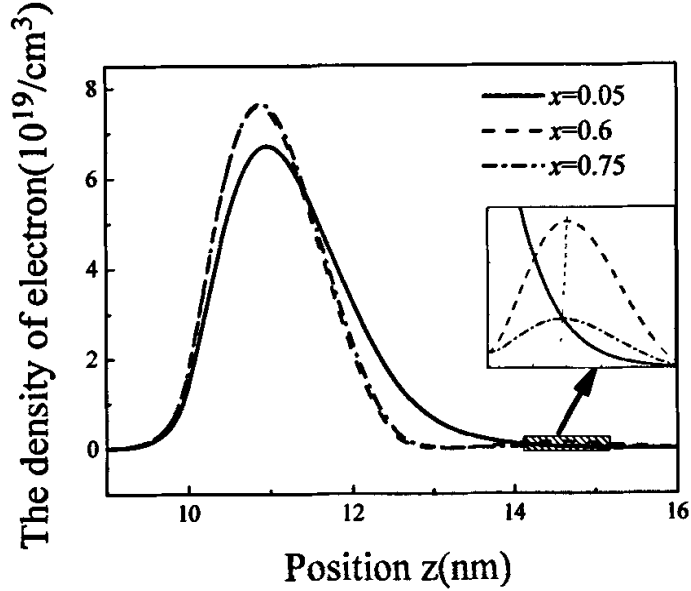


图16 中间耦合势垒层的Al组份 x 不同的情况下， $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的电子分布。

从图14中可以看到，左边量子阱中的电子分布主要由 1_{odd} 子带上的载流子占据数决定，右边量子阱中的电子分布主要由 1_{even} 子带上的载流子占据数决定， 1_{even} 子带和 1_{odd} 子带之间的能量差大于 240meV ，根据费米分布函数，这使得 1_{odd} 子带上电子的占据概率比 1_{even} 大很多，因而电子主要分布在左边量子阱中；由于势垒层中的掺杂浓度是固定的，为 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ ，随着中间耦合势垒层中Al组份的增加，其中施主的电离越来越大，这使得整个 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中电子浓度增加，这就是起初两个量子阱中电子浓度都随中间耦合势垒层中Al组份的增加而增加的原因；随着中间耦合势垒层的增高，双量子阱的左边量子阱相对于原来的单量子阱的阱宽变窄，因而 1_{odd} 子带波函数理所当然被限制得更厉害，其分布范围比原来单量子阱中得基态更窄，所以电子分布的半高宽随着Al组份的增加而减小；另外当势垒层高度增加到一定程度的时候，中间耦合势垒层中的施主已全部电离，因而整个

双量子阱中的电子浓度不再随Al组份的增加而增加。

图17给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层中Al组份对其子带间跃迁吸收系数的影响，Al组份的变化范围是从0到0.75，其计算结构、极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图14一致。从图中可以看到 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随中间耦合势垒层中Al组份的增加而增加， $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数几乎不随Al组份的变化而变化， $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数先随Al组份的增加而增加，后随Al组份的增加而减小。

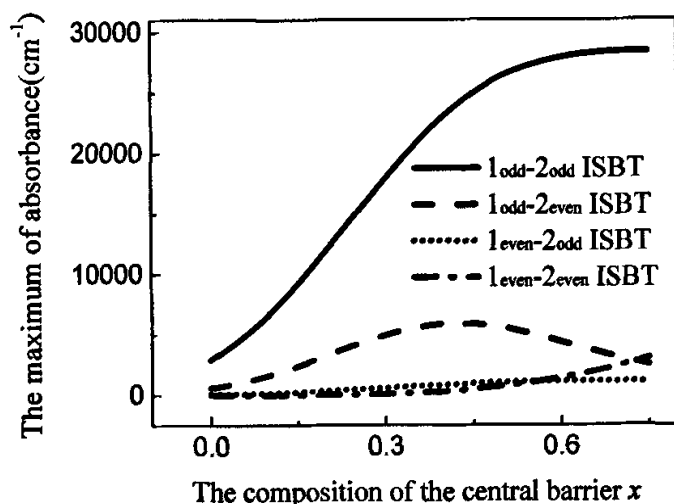


图 17 中间耦合势垒层的 Al 组份 x 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁吸收系数的影响。

在这里吸收系数主要决定于波函数的重叠和基态子带的载流子占据数。在Al组份变化的整个过程中 1_{odd} 子带波函数都分布左边的三角形量子阱中，随着Al组份的增加，奇序子带波函数移向左边量子阱中，偶序子带波函数移向右边量子阱中，因而 1_{odd} 子带和 2_{odd} 子带波函数的重叠随Al组份的增加而增加，同时势垒层中施主的离化随Al组份的增大而增加，量子阱中基态子带上的载流子占据数也随Al组份的增加而增加，所以 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随Al组份的增加而增加。在Al组份很小时，双量子阱可以被看成单量子阱，在单量子阱中第二子带（随着Al组份的增加它将变成 1_{even} 子带）和第四子带（随着Al组份的增加它将变成 2_{even} 子带）波

函数具有相同的对称性，根据偶极矩阵元的表达式 (50)，波函数具有相同对称性的两个子带之间的跃迁被禁止，当偶序子带波函数移向右边量子阱时，这两个偶序子带波函数具有相反对称性，它们之间的交叠积分随中间耦合势垒层中Al组份的增加而增加，因而 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数也随Al组份的增加而增加。起初 1_{odd} 子带被限制在左边的三角形量子阱中，当中间耦合势垒层中Al组份很小的时候，Al组份的变化对 1_{odd} 子带和 2_{even} 子带波函数的分布几乎没有影响，另外正如图16中所述，随着Al组份的增加，势垒层中施主的电离越来越大，基态 1_{odd} 子带上的电子浓度随着Al组份的增加而增加，因而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随Al组份的增加而增加；当Al组份较大的时候，势垒层中施主已经完全离化，基态上的载流子占据数随Al组份的增加变化不大，但是随着Al组份的增加 2_{even} 子带波函数逐渐移向右边量子阱中，这使得 1_{odd} 子带和 2_{even} 子带之间波函数的重叠大大减少，从而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随Al组份的增加而减小。

3.4 中间耦合势垒层厚度的影响

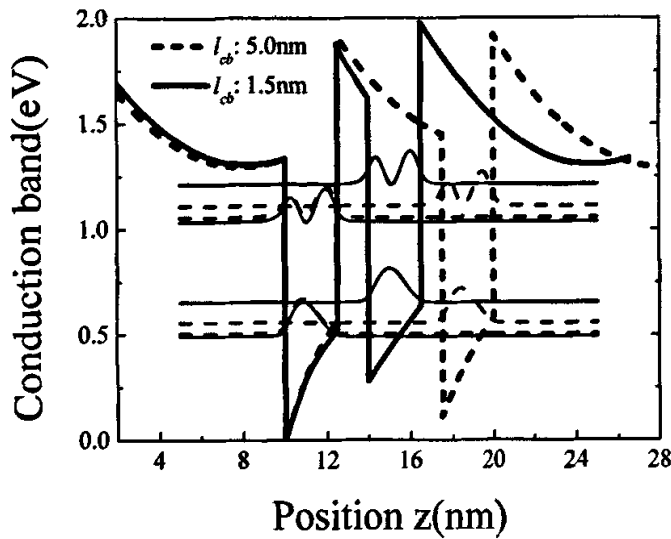


图 18 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数的模平方。其中实线和虚线分别表示中间耦合势垒层厚度 l_{cb} 为 1.5nm 和 5.0nm 的情况。

图18给出了 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数的模平方，在此所用的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的结构是 $10\text{nm } \text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.5\text{nm } \text{GaN}/l_{cb} \text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.5\text{nm } \text{GaN}/10\text{nm } \text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ ，其中间耦合势垒层厚度分别为1.5和5.0nm，极化场不连续为3MV/cm，势垒层掺杂浓度为 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。实线表示中间耦合势垒层为1.5nm的情况；虚线表示中间耦合势垒层为5.0nm的情况。耦合双量子阱的子带按能量从小到大依次为 1_{odd} 、 1_{even} 、 2_{odd} 、 2_{even} 子带。从图中我们看到，中间耦合势垒层的厚度对奇序子带的位置几乎没有影响，但是偶序子带的位置随着中间耦合势垒层厚度的增加而降低，两个量子阱之间的电势降落也随中间耦合势垒层厚度的增加而减小。

从3.2节中可知由极化感应电场引起的两个量子阱之间的电势降落为 $eF_{iw}l_{iw} + eF_{cb}l_{cb}$ 。因为 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的势垒层中极化感应电场的方向和势阱中的极化感应电场的方向相反，如果假设势阱中的极化感应电场的方向为正，则势垒层中的极化感应电场的方向为负。当中间耦合势垒层厚度增加的时候，则两个量子阱之间电势降落的表达式中的后一项沿负向增大，因而，两个量子阱之间的电势降落随着中间耦合势垒层厚度的增加而减小。另外正如3.2节所述，如果将奇序子带看成左边量子阱中的子带，偶序子带波函数看成右边量子阱中的子带，左右量子阱中相应的子带对之间的Stark shift近似为左右两个量子阱之间的电势降落，由于两个量子阱之间电势降落随着中间耦合势垒层厚度的增加而减少，两个量子阱中相应的子带对之间的Stark shift也随着中间耦合势垒层厚度的增加而减少，另外由于中间耦合势垒层厚度对左边量子阱没有影响，因此，左边量子阱中的子带随中间耦合势垒层的增加没有变化，而偶序子带随着中间耦合势垒层厚度的增加而下降。

图19给出了 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层厚度对双量子阱中子带间跃迁波长的影响，其中间耦合势垒层厚度的变化范围是从0.5到5.0nm，双量子阱的结构、界面处的极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图18一致。从图中我们可以看到， $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层厚度对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长的影响较小，而对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长的影响较大。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层厚度的增加而增加， $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层厚度的增加而减小。

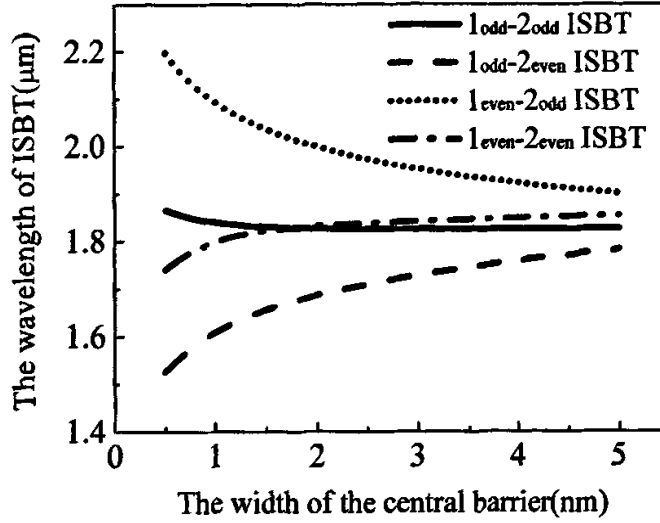


图 19 中间耦合势垒层的厚度 l_{cb} 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁波长的影响。

由于 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中两个量子阱之间的电势降落为 $eF_{lw}l_{hw} + eF_{cb}l_{cb}$ ，并且双量子阱中相应的子带对之间的 Stark shift 可以近似为两个量子阱之间的电势降落。随着中间耦合势垒层厚度 l_{cb} 的增加，两个量子阱之间的电势降落减小，但是左边量子阱几乎没有发生变化，因而被看作左边量子阱中的子带的奇序子带的位置几乎没有变化，被看作右边量子阱中的子带的偶序子带的位置下降（如图18所示）。这将导致 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层厚度的增加而增加， $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层厚度的增加而减小。另外，由于 1_{even} 子带的位置的下降，使得 1_{odd} 子带上载流子占据数减小， 1_{even} 子带上载流子占据数增加，这使得两个量子阱中的电子屏蔽效应有微小的改变，从而使得两个量子阱阱底的形状有微小的改变，这将导致 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层厚度的增加略有减小， $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随中间耦合势垒层厚度的增加略有增加。

图20给出了 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层厚度不同的情况下的电子分布，中间耦合势垒层的厚度分别为1.5、2.5、5.0nm，其计算结构，界面处

的极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图18一致。从图中可以看到，随着中间耦合势垒层厚度的增加，左边量子阱中电子浓度减小，而右边量子阱中电子浓度增加。双量子阱中电子分布随着中间耦合势垒层厚度的增加而变得越来越对称。

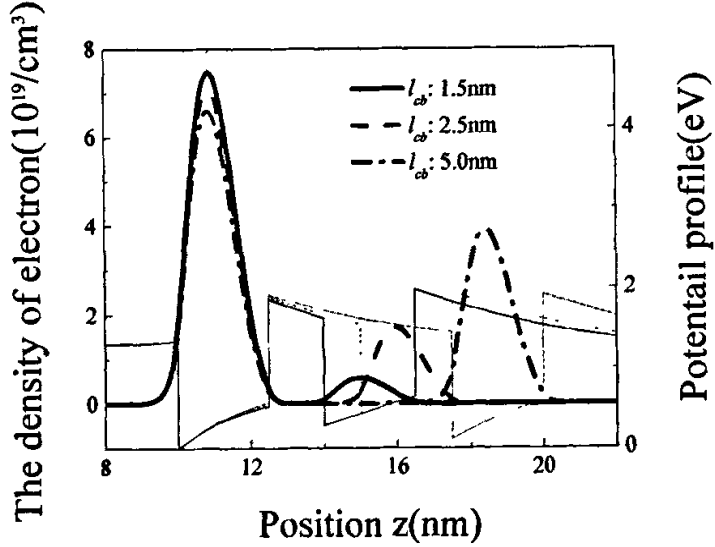


图 20 中间耦合势垒层厚度 l_{cb} 不同的情况下, $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的电子分布。

正如上面所述，随着中间耦合势垒层的增加， $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的两个量子阱之间的电势降落减小，并且两个量子阱中相应的子带之间的 Stark shift 减小，偶序子带的位置也下降。这将导致右边量子阱中电子浓度随着中间耦合势垒层厚度的增加而增加，由于电荷中性条件，整个双量子阱中总的电子浓度几乎保持不变，因而左边量子阱中电子浓度随着中间耦合势垒层厚度的增加而减小，从而使得 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中电子浓度的分布随着中间耦合势垒层厚度的增加变得越来越对称。

图 21 给出了 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层厚度对双量子阱中子带间跃迁吸收系数的影响，中间耦合势垒层厚度的变化范围是从 0.5 到 5.0nm，其计算结构，界面处的极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图 18 一致。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随中间耦合势垒层厚度的增加剧烈地减少， $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$

子带间跃迁吸收系数也随中间耦合势垒层厚度的增加而减少，而 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随中间耦合势垒层厚度的增加而增加。

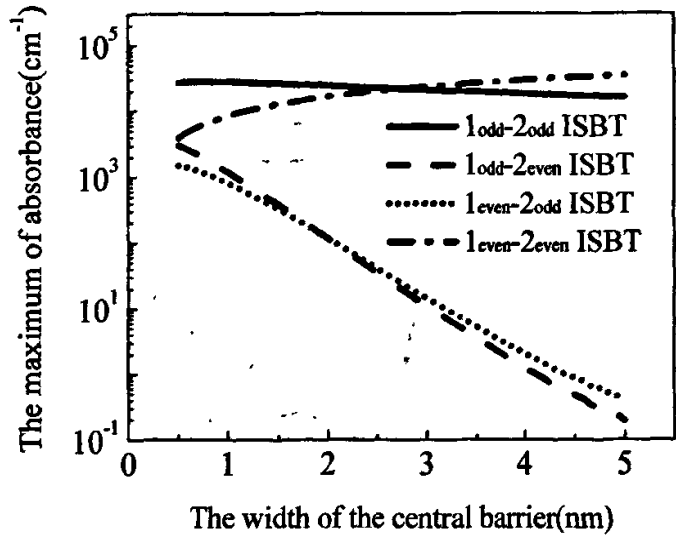


图 21 中间耦合势垒层的厚度 l_{cb} 对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中子带间跃迁吸收系数的影响。

随着 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层厚度的增加，子带波函数的隧穿减小，从而奇序子带波函数和偶序子带波函数的重叠减少，因此， $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随中间耦合势垒层厚度的增加而剧烈地减少。另外由费米分布函数可知我们所计算的双量子阱中的电子主要占据在基态子带上，正如图20所示，随着双量子阱的中间耦合势垒层厚度的增加， 1_{odd} 子带上电子浓度减少， 1_{even} 子带上电子浓度增加，而奇序子带波函数之间和偶序子带波函数之间的重叠随着中间耦合势垒层厚度的增加几乎保持不变，因此， $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随中间耦合势垒层厚度的增加而减少，而 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随中间耦合势垒层厚度的增加而增加。

3.5 势垒层中掺杂浓度的影响

图 22 给出了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱导带结构和波函数的模平方，在这里所用的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的结构是 $10\text{nm Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.5\text{nm GaN}/1\text{nm Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/2.5\text{nm GaN}/10\text{nm Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ ，界面处的极化场不连续为 $3\text{MV}/\text{cm}$ 。实线表示势垒层掺杂浓度为 $7\times 10^{18}/\text{cm}^3$ 的情况，方框表示其费米能级；虚线表示势垒层掺杂浓度为 $7\times 10^{19}/\text{cm}^3$ 的情况，圆圈表示其费米能级。耦合双量子阱的子带按能量从小到大依次为 1_{odd} 、 1_{even} 、 2_{odd} 、 2_{even} 子带。从图中我们看到，随着掺杂浓度的增加，导带向下弯曲更多，双量子阱的有效阱深变浅，基态子带的位置上升，激发态子带的位置下降，另外激发态子带位置高于体势垒层的导带边，并且激发态子带波函数在体势垒层有分布。

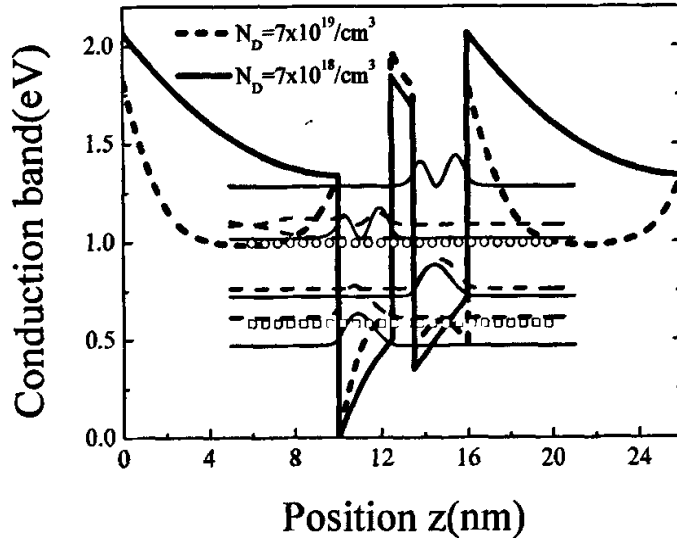


图 22 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数的模平方。其中实线和虚线分别表示势垒层掺杂浓度 N_D 为 $7\times 10^{18}/\text{cm}^3$ 和 $7\times 10^{19}/\text{cm}^3$ 的情况。

从图中可以看到，由于势垒层掺杂浓度的增加，离化施主和电子浓度也随之增加，电子会移动到量子阱中从而使得离化施主和电子在空间上分离，根据泊松方程，空间电荷将引起电场的变化，从而使导带发生弯曲，在这里使得势垒层导带往下弯曲，势阱导带往上弯曲。势阱导带往上的弯曲引起阱底上升，从而基态子带位置上升，另外由于导带的弯曲使得双量子阱的有效势阱深度变浅，因而激

发态子带的位置下降，甚至双量子阱不能限制激发态子带，使得激发态子带的位置高于体势垒层的导带边，其波函数隧穿到体势垒层导带弯曲形成的“量子阱”中。

图 23 给出了不同势垒层掺杂浓度的情况下，极化场不连续对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长的影响。其势垒层掺杂浓度分别为 $5 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ 、 $2 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 、 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 和 $1 \times 10^{19}/\text{cm}^3$ ，极化场不连续的变化范围为 0 到 3 MV/cm，计算结构与图 22 一致。从图中可以看到， $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随势垒层掺杂浓度的增加而增加，另外，对于越大势垒层掺杂浓度的双量子阱，极化场不连续对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长的影响越小。

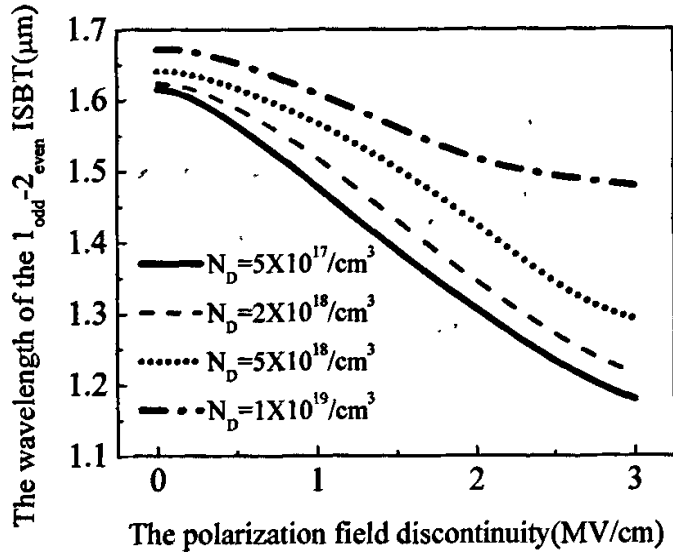


图 23 不同势垒层掺杂浓度 N_D 情况下，极化场不连续对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长的影响。

随着势垒层掺杂浓度的增加，导带弯曲程度的增加和有效量子阱深度的变浅，其基态子带和激发态子带之间能量差随之减小，因而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随着势垒层掺杂浓度的增加而增加。对于势垒层掺杂浓度比较大的情况，极化场不连续对 2_{even} 子带位置的影响比较小，而对于势垒掺杂浓度比较小的情况，极化场不连续对 2_{even} 子带位置的影响比较大，因此，相对于势垒层掺杂浓度较小时的情况，势垒层掺杂浓度较大时 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长对极化场不连续的变化

不太敏感。

图 24 给出了不同势垒层掺杂浓度情况下, $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的电子分布, 其中势垒层掺杂浓度分别为 $2 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ 、 $7 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 、 $2 \times 10^{19}/\text{cm}^3$ 和 $7 \times 10^{19}/\text{cm}^3$, 计算结构和界面处的势垒层掺杂浓度与图 22 一致。从图中可以看到 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的两个量子阱中电子浓度的峰值随势垒层掺杂浓度的增加而增加, 并且电子在双量子阱中的分布随着势垒层掺杂浓度的增加变得越来越对称。另外左边量子阱中电子浓度的峰值随着势垒层掺杂浓度的增加而向左移动, 右边量子阱中电子浓度的峰值随着势垒层掺杂浓度的增加而向右移动。

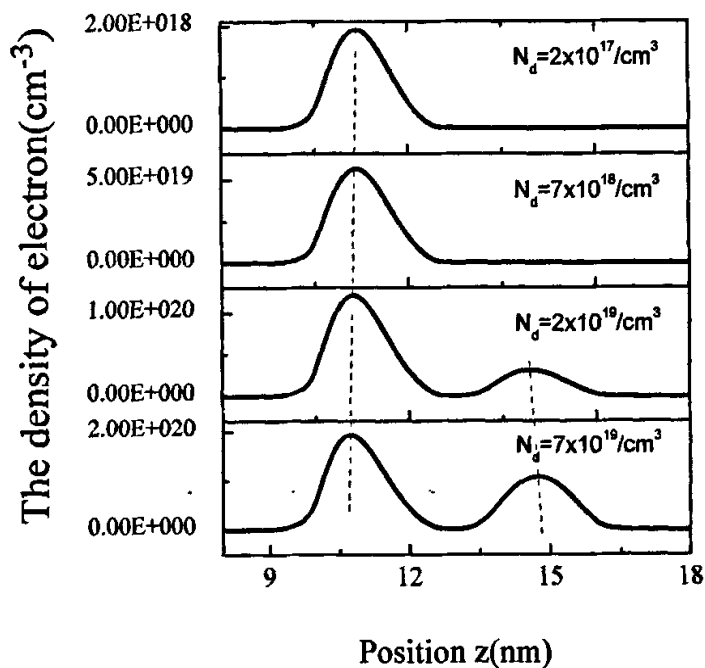


图 24 不同势垒层掺杂浓度 N_D 情况下, $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的电子分布。

随着 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的势垒层掺杂浓度的增加, 由于施主的离化及电子的移动, 势阱中的电子浓度也随之增加。另外, 由于极化场不连续和电子屏蔽效应共同作用的结果, 使得左边量子阱的阱底上升, 其基态子带的位置也随之上升, 而右边量子阱中的基态子带的位置相对变化不大, 从而 1_{odd} 子带和 1_{even} 子带之间的相对位置减小了, 这使得它们和费米能级之间具有相差不多的能量间距,

而两个量子阱中的电子浓度具有差不多大小的峰值,因此 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的电子分布随着势垒层掺杂浓度的增加变得越来越对称。

图 25 给出了不同势垒层掺杂浓度的情况下,极化场不连续对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数的影响。其势垒层掺杂浓度分别为 $5 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ 、 $2 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 、 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 和 $1 \times 10^{19}/\text{cm}^3$,极化场不连续的变化范围是从 0 到 $3 \text{ MV}/\text{cm}$,计算结构与图 22 一致。从图中可以看到, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随势垒层掺杂浓度的增加而增加,另外,对于越大势垒层掺杂浓度的双量子阱,极化场不连续对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数的影响越大,当极化场不连续在 $2.5 \text{ MV}/\text{cm}$ 附近时,各种势垒层掺杂浓度情况下的 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数为 0。

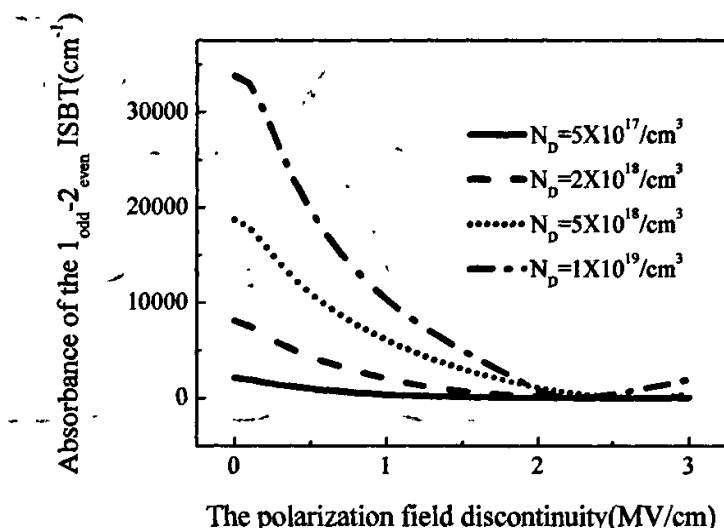


图 25 不同势垒层掺杂浓度 N_D 情况下,极化场不连续对 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数的影响。

随着 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的势垒层掺杂浓度的增高,势垒层中施主的电离和电离电子的移动,势阱中电子浓度增加。另外在我们的计算结构中,双量子阱中的电子主要占据在基态上,由第二章可知,吸收系数主要由基态上的电子浓度、波函数的交叠积分和洛伦兹线形函数决定,因此 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随着势垒层掺杂浓度的增大而增大。势阱中电子浓度较大的时候,由于

$\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱体势垒层的弯曲,极化场不连续使得原本在体势垒层导带附近的激发态子带的位置高于体势垒层,从而激发态子带波函数在体势垒层弯曲所形成的量子阱中也有相当的分布,然而 1_{odd} 子带在体势垒层中没有分布,这使得极化场不连续对 1_{odd} 子带波函数和 2_{even} 子带波函数之间的重叠的影响较势垒层掺杂浓度较小的时候大,因此,和势垒层掺杂浓度较小时的情况相比,势垒层掺杂浓度较大时 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随极化场不连续的变化更为敏感。另外当极化场不连续在 $2.5\text{MV}/\text{cm}$ 附近时, 1_{odd} 子带波函数和 2_{even} 子带波函数之间几乎没有重叠,因而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数很小,几乎为 0。

本章小结

GaN基材料系统是一个具有大的压电和自发极化效应的系统,和那些没有极化效应或者极化效应很小的材料如GaAs系统相比,这个极化效应使得GaN的能带分布情况大不一样。例如:对于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 异质结构,即使不加外加电场,也会在异质结构面处形成很深很窄的三角形量子阱,并且在异质结构界面处形成增强型沟道、其中具有很高的载流子浓度。本章通过自洽求解薛定谔方程和泊松方程的方法研究了极化效应及 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的结构参数对子带间跃迁的影响。通过数值计算研究发现极化效应使得双量子阱的导带结构、波函数分布和电子分布具有不对称性,双量子阱的两个量子阱之间出现一个大的电势降落。同时极化感应电场使得量子阱中的子带发生Stark shift,由于Stark shift奇偶序子带之间的共振被解除,奇序子带波函数主要分布在左边量子阱中,偶序子带波函数主要分布在右边量子阱中,从而可以将奇序子带近似看成左边量子阱中的子带,偶序子带近似看成右边量子阱中的子带,这样,奇偶序子带之间的Stark shift可以近似为两个量子阱之间的电势降落。双量子阱的使用是为了获得三能级或四能级系统,无论是利用双量子阱来获得三能级系统还是四能级系统, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁都具有非常重要的意义。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长和吸收系数随着极化场不连续的增大而减小。另外由于极化效应的存在,使得双量子阱的结构参数对子带间跃迁的影响也和平带时双量子阱的结构参数对子带间跃迁的影响不同。 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随着中间耦合势垒层中Al组份的增加变化不

大, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随中间耦合势垒层中Al组份的增加先变大后变小, 当中间耦合势垒层中Al组份为0.45时, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数具有最大值。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长随着中间耦合势垒层厚度的增加而增加, 而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随着中间耦合势垒层厚度的增加而减小。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长和吸收系数随着势垒层掺杂浓度的增大而增大, 其中当势垒层掺杂浓度小于 $2 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 时, 势垒层掺杂浓度对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长影响不大, 而对 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数影响较大。综上所述, 要想利用对称的 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱获得短波长的 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁的同时获得较大的 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数, 可行的办法是适当降低中间耦合势垒层中的Al组份和减小中间耦合势垒层厚度, 另外在势垒层掺杂浓度小于 $2 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 的情况下, 增加势垒层掺杂浓度可以保持在 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长不变的情况下较大的增加 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数。

第四章 极化场及 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱结构参数对 Anticrossing gap 的影响

4.1 引言

从第三章我们看到, 由于GaN基半导体材料具有强的极化效应, 使得GaN基双量子阱的行为和GaAs基双量子阱大不相同。对于周期性边界条件下的中间耦合势垒层足够薄的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 双量子阱, 如果其两个GaAs量子阱的阱深和阱宽都一样, 其它结构参数和掺杂浓度也是对称的, 则这个双量子阱的导带结构、波函数分布和电子分布都是对称的。两个量子阱中相应的子带之间具有相同的能量, 众所周知具有相同能量的子带上的电子会发生共振隧穿从一个量子阱隧穿到另一个量子阱[113]。这样利用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 双量子阱很容易实现三能级或四能级系统, 从而有利于实现工作在中红外的超快双色光电子器件。而对于周期性边界条件下的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱, 即使两个GaN量子阱的阱深和阱宽一样, 同时其它结构参数和掺杂浓度是对称的, 由于极化场的存在, 使得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构不对称, 两个量子阱之间出现一个大的电势降落。这使得两个量子阱的基态(或激发态)子带对之间出现一个大的Stark shift, 从而基态(或激发态)子带对不再具有相同的能量, 子带上的电子也不再发生共振隧穿, 此时, 每个子带的波函数主要分布在其中一个量子阱中, 电子分布也不对称。在这种情况下即使 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层很薄, 其中一个量子阱中的子带上的电子隧穿到另一个量子阱中的概率也很小, 这样很难实现三能级或四能级系统。为了利用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱得到三能级或四能级系统, 我们必须增加子带上电子从一个量子阱到另一个量子阱的隧穿概率。一个行之有效的办法是使两个量子阱中的子带对之间重新发生共振, 使其波函数在两个量子阱中都有大的分布。我们可以有两种方法来实现子带对之间的共振: 其一是加电场, 使量子阱中的子带发生Stark shift, 从而调节基态(或激发态)子带对之间的能量间距, 当基态(或激发态)子带对之间的能量间距近似为0时基态(或激发态)子带对发生共振; 其二是变化其中一个量子阱的阱宽来调节该量子阱中子带的能量位置以及它和另一

个量子阱中相应的子带之间的能量间距，比如：对于本文中的计算模型，适当加宽右边量子阱的阱宽，使其中子带的能量位置下降以至和左边量子阱中相应的子带之间发生共振，适当减小左边量子阱的阱宽，使其中的子带的能量位置上升也可以达到共振的目的。在本章中，我们主要是通过加电场的方法来实现子带对之间的共振，并研究了共振时的anticrossing现象，以及 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的结构参数对anticrossing gap的影响。在下一章中，我们主要是通过变化量子阱宽度的方法来实现子带对之间的共振，并设计了三能级或四能级系统的双量子阱，这种结构的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱对工作于光纤通信波段的超快双色光电子器件有很大的应用潜力。

4.2 Anticrossing 和 anticrossing gap

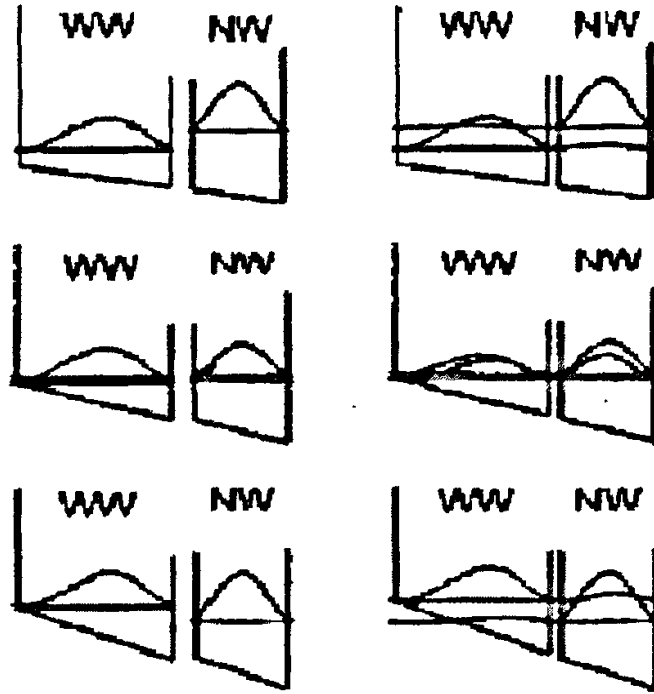


图26 左边的图表示外加电场对两个量子阱之间没有耦合的双量子阱的影响。右边的图表示外加电场对耦合双量子阱的影响。

正如本章引言所述，如果双量子阱中的子带对具有不相同的能量，可以通过

加外电场的办法来调整子带对之间的相对的能量间距。图26就是外加电场对双量子阱以及其子带的影响，左边的图表示没有耦合的双量子阱，右边的图表示耦合双量子阱[114]。所加的外电场方向向左，电场大小为从上到下依次增大。从左边的图我们看到的，起初右边量子阱中子带的能量位置高于左边量子阱，随着所加电场的增大，右边量子阱中子带的能量位置相对于左边量子阱中的子带位置下降。如果所加电场的大小合适，左边量子阱和右边量子阱中的子带对可以具有相同的能量。如果所加电场进一步增大，右边量子阱中子带的能量位置相对与左边量子阱进一步下降，以至右边量子阱中子带的能量位置低于左边量子阱中的子带位置。这样我们不难想像，如果我们作一个横坐标为外加电场，纵坐标为子带的能量位置的图，对于没有耦合的双量子阱，左右两个量子阱中的子带应该交叉，其中交叉点表示两个量子阱中的子带对具有相同能量时的情况。

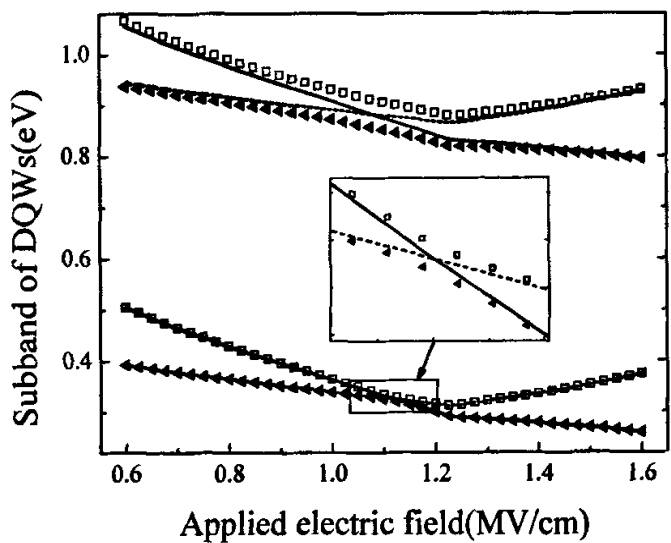


图 27 外加电场对双量子阱中子带的能量位置的影响。实线和虚线表示没有耦合的两个量子阱中子带；空心方块和实心三角形表示耦合双量子阱中子带。

图27表示外加电场对双量子阱中子带的能量位置的影响，其中实线表示没有耦合时双量子阱的右边量子阱中的子带，虚线表示没有耦合时双量子阱的左边量子阱中的子带；而空心方块表示耦合双量子阱中的偶序子带，实心三角形表示耦

合双量子阱中的奇序子带。从图27可以看到，起初，实线的能量比虚线高，随着外加电场的增大，实线和虚线之间的相对位置先减小直至交叉，而后又增加，并且实线的能量比虚线低，正如前面所说，非耦合的两个量子阱中的子带发生交叉，交叉点表示两个量子阱中的子带具有相同的能量。而对于耦合双量子阱的情况，从图27中我们可以看到，起初空心方块和实心三角形所表示的子带之间的能量间距随电场的增大而减小，减小到某一有限最小值后，子带之间的能量间距随电场的增大而增大。在所加电场增大的过程中，空心方块所表示的子带的能量位置始终高于实心三角形所表示的子带位置，它们不会发生交叉，这种不发生交叉的现象叫做anticrossing现象。

图26右边的图显示了实现anticrossing的过程，从该图中可以看到，起初当外加电场很小的时候，具有较低能量的子带的波函数主要分布在左边的量子阱中，而具有较高能量的子带的波函数主要分布在右边的量子阱中。随着外加电场的增大，具有较低能量的子带的波函数逐渐隧穿到右边的量子阱中，而具有较高能量的子带的波函数逐渐隧穿到左边的量子阱中。随着两个量子阱中子带对的能量间距的减小，两个子带的波函数在两个量子阱中都有分布，当两个子带的能量间距最小时，两个子带中每个子带的波函数在两个量子阱中都有差不多相等的分布，也就是说两个子带中每个子带上的电子分布在左边量子阱和右边量子阱中的概率差不多各为50%。当电场进一步增大时，具有较低能量的子带的波函数进一步隧穿到左边的量子阱中，具有较高能量的子带的波函数进一步隧穿到右边的量子阱中。最终，具有较低能量的子带的波函数由主要分布在左边的量子阱中变为主要分布在右边的量子阱中，而具有较高能量的子带的波函数由主要分布在右边的量子阱中变为主要分布在左边的量子阱中。也可以这么说，随着外加电场的增大，左边量子阱的子带通过其波函数的隧穿最终变成了右边量子阱的子带，而右边量子阱的子带通过其波函数的隧穿最终变成了左边量子阱的子带。因此，从本质上讲这两个量子阱中的子带是通过其波函数的隧穿实现了anticrossing的。

图28表示了外加电场对图27中基态子带对和激发态子带对的能量间距的影响，其中实线表示两个量子阱中基态子带对之间的能量间距，虚线表示两个量子阱中激发态子带对之间的能量间距。可以看到基态子带对和激发态子带对之间的能量间距先是随着外加电场的增加而减小，后是随着外加电场的增加而增大，但

是无论是基态子带对还是激发态子带对之间的能量间距都存在一个不为0的有限最小值[115,116],而且基态子带对之间能量间距的最小值小于激发态子带对之间能量间距的最小值。这个不为0的有限最小值就是anticrossing gap, 它可以用来衡量耦合双量子阱的两个量子阱之间的耦合程度。

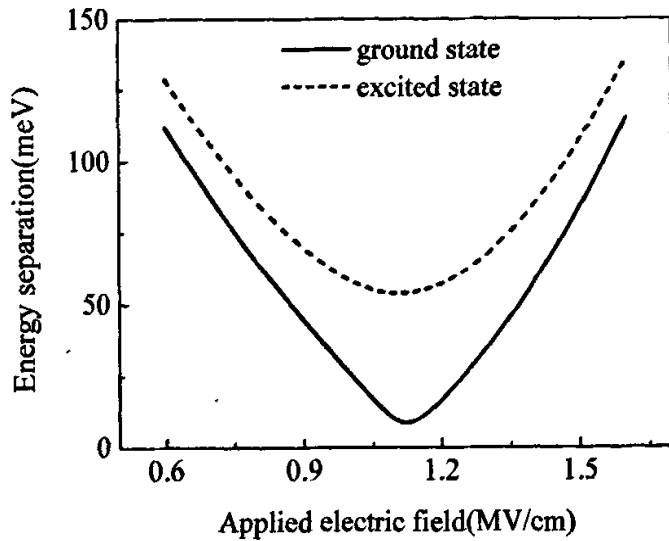


图28 外加电场对基态和激发态子带对之间能量间隔的影响。

图29给出了外加电场对双量子阱中子带对之间能量间距和该子带对之间的偶极跃迁矩阵元的影响, 实线(相应于左边的纵坐标)表示能量间距, 虚线(相应于右边的纵坐标)表示偶极跃迁矩阵元[117]。从图中我们可以看到, 当双量子阱中子带对之间的能量间距随外加电场减小的时候, 子带对之间的偶极跃迁矩阵元随外加电场增大; 当子带对之间的能量间距随外加电场增加的时候, 子带对之间的偶极跃迁矩阵元减小; 在子带对之间的能量间距的最小值处, 子带对之间的偶极跃迁矩阵元具有最大值。正如式子(51)所显示的那样, 偶极矩阵元主要描述的是参与跃迁的两个子带的波函数在空间上的重叠。起初, 子带对中的一个子带波函数主要分布在双量子阱中的一个量子阱中, 而另一个子带波函数主要分布在另一个量子阱中, 此时, 这两个子带的波函数几乎没有重叠。随着外加电场的增大, 双量子阱中子带对之间的能量间距减小, 子带对之间的共振也增强, 同时两

个量子带波函数的隧穿也增大，两个量子带波函数从分别主要分布在双量子阱的不同量子阱中变为在两个量子阱中都有分布，这样这两个量子带波函数在空间上的重叠增大，偶极跃迁矩阵元也增大。反之亦然。当双量子阱中量子带对之间的能量间距具有最小值时，量子带对之间的共振最强，量子带波函数在两个量子阱中的分布大致相同，此时两个量子带波函数在空间上完全重叠，因此偶极跃迁矩阵元最大。在其它条件相同的情况下，波函数重叠少，则这两个量子带之间跃迁的吸收系数就小，如果波函数重叠大，则这两个量子带之间跃迁的吸收系数就可能大。之所以说可能，是因为吸收系数的大小不仅仅取决于两个波函数重叠的大小，还取决于两个波函数的对称性，但是两个波函数在空间上重叠大是获得大的吸收系数的必要条件。

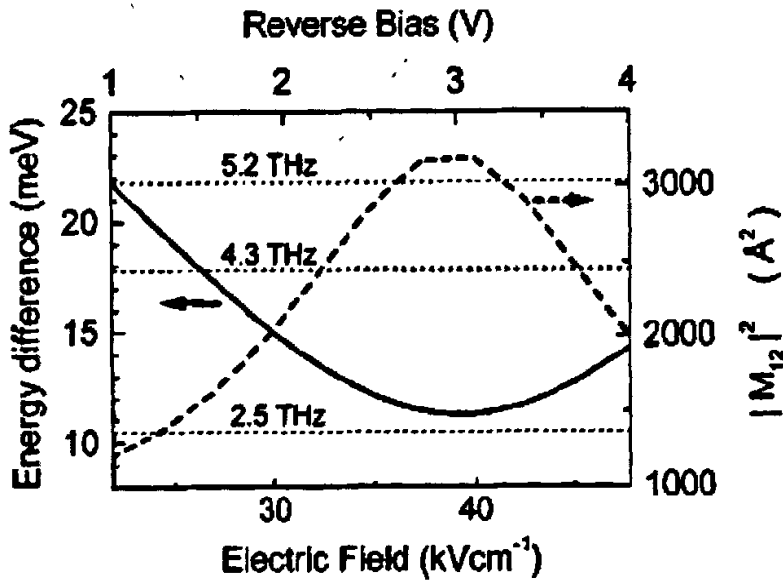


图29，外加电场对双量子阱中量子带对之间的能量间距和其跃迁矩阵元的影响。图中实线表示量子带对之间的能量间距，虚线表示量子带对之间的跃迁矩阵元。

理论上可以这么解释[118,119]，当耦合双量子阱中量子带对之间的能量间距减小时，量子带对之间的相互作用增强以及由此产生的微扰势增大，这种相互作用反过来又会影响这两个量子带，并使这两个量子带的能量重新分配。这两个量子带相互作用的哈密顿量可以表示为：

$$H(x) = \begin{pmatrix} E_{left} & V_{left-right} \\ V_{left-right} & E_{right} \end{pmatrix}, \quad (54)$$

其中, E_{left} 表示非耦合的左边量子阱中子带的能量; E_{right} 表示非耦合的右边量子阱中子带的能量; $V_{left-right}$ 表示左右量子阱中子带对之间的相互作用。要得到非零解, 它必须满足久期方程:

$$\begin{vmatrix} E_{left} - E & V_{left-right} \\ V_{left-right} & E_{right} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (55)$$

由此可以得到能量重新分配后耦合双量子阱的两个子带的能量分别可以表示为:

$$\begin{aligned} E_{even} &= \frac{1}{2} \left[E_{left} + E_{right} + \sqrt{(E_{left} - E_{right})^2 + 4V_{left-right}^2} \right], \\ E_{odd} &= \frac{1}{2} \left[E_{left} + E_{right} - \sqrt{(E_{left} - E_{right})^2 + 4V_{left-right}^2} \right], \end{aligned} \quad (56)$$

其中, E_{even} 和 E_{odd} 分别表示能量重新分配后耦合双量子阱的偶序子带和奇序子带的能量。从以上的公式中我们可以看到, 奇序子带和偶序子带之间的能量差为 $\sqrt{(E_{left} - E_{right})^2 + 4V_{left-right}^2}$ 。只要存在相互作用, 即只要 $V_{left-right}$ 不为0, 奇序子带和偶序子带之间的能量差就不为0, 也就是说耦合双量子阱的子带对之间永远不会发生交叉, 这就从理论上解释了耦合双量子阱的anticrossing现象。当耦合前左右量子阱中的子带具有相同的能量的时候, 耦合后此时的能量差最小, $|2V_{left-right}|$ 给出了这个最小的能量差(即anticrossing gap)的理论值。更为直观的解释是, 当非耦合的两个量子阱中的子带具有相同的能量时, 这两个子带是简并的; 此时对于耦合双量子阱这两个子带之间的相互作用最大、共振最强, 它们之间的相互作用产生一个微扰势并使这两个简并的子带劈裂成两个具有不同能量的子带, 此时它们之间的能量差就是anticrossing gap。为了理解anticrossing现象, 在这里我们可以将子带对比作两个带有同种电荷的相向运动的电子, 当它们相互靠近时, 它们之间的库仑相互作用随之增加, 由于库仑排斥力的存在, 这两个电子不会发生碰撞, 也就是这两个电子之间的距离无论怎么小, 但不会为0, 最终这两个电子会由相向运动变为背向运动。但是对于一个具体的半导体双量子阱, 尤其是象GaN基这样的具有大的极化效应的、导带结构不对称的半导体双量子阱, 极化场和双量子阱的结构参数对anticrossing gap的影响尚不清楚。本章以下的内容就是通过数值求解的方法研究了异质结构界面处极化场不连续和双量子阱的结构参数对anticrossing gap的影响。

4.3 极化场不连续的影响

图30表示 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱界面处的极化场不连续对双量子阱中子带对之间的icrossing gap的影响，双量子阱的结构是 $10\text{nm } \text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/2.5\text{nm GaN}/1\text{nm } \text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/2.5\text{nm GaN}/10\text{nm } \text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}$ ，极化场不连续的变化范围是从0到 $3\text{MV}/\text{cm}$ ，掺杂浓度是 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。图中实线表示基态子带对之间的anticrossing gap，虚线表示激发态子带对之间的anticrossing gap。从图中可以看到极化场不连续对基态和激发态子带对之间的anticrossing gap几乎没有影响。事实上，极化场不连续和外加电场共同作用的结果是改变势垒和势阱的形状，它对中间耦合势垒层的厚度以及相对于基态和激发态子带对的势垒层高度几乎没有影响。因此我们可以得出结论：双量子阱的势阱和势垒层的形状对anticrossing gap几乎没有影响。

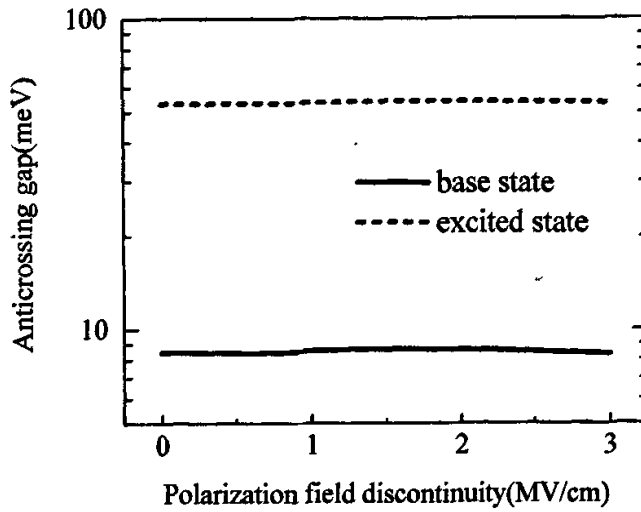


图30 极化场不连续对基态和激发态的anticrossing gap的影响。

4.4 中间耦合势垒层中 Al 组份的影响

图31表示 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层的Al组份对其子带对之间的anticrossing gap的影响，双量子阱的计算结构和4.3节不同的是中间耦合势垒层中Al组份是变化的，中间耦合势垒层的Al组份 x 的变化范围是从0.15到0.75，极化场不连续是 $3\text{MV}/\text{cm}$ ，势垒层掺杂浓度是 $5 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。图中实线表示基态子带对之间的anticrossing gap，虚线表示激发态子带对之间的anticrossing gap。从图中可以看到，无论是基态子带对还是激发态子带对之间的anticrossing gap都随 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层的Al组份的增加而减小。其中激发态子带对之间的anticrossing gap只有当中间耦合势垒层的Al组份大于0.47时才有意义。这是因为当中间耦合势垒层的Al组份小于0.47时，激发态子带的能量位置位于中间耦合势垒层之上，此时双量子阱的上半部分相当于单量子阱，而激发态子带实质上可以认为是单量子阱中的子带。对于单量子阱中的两个分立的能级是不会发生耦合的，更不会有anticrossing现象，anticrossing现象仅仅是针对两个或多个耦合的子带而言的，所以此时的激发态子带也就根本谈不上具有anticrossing gap。只有当中间耦合势垒层的Al组份大于0.47时，激发态子带才会被限制在双量子阱中，因此才有可能发生共振并谈得上具有anticrossing gap。

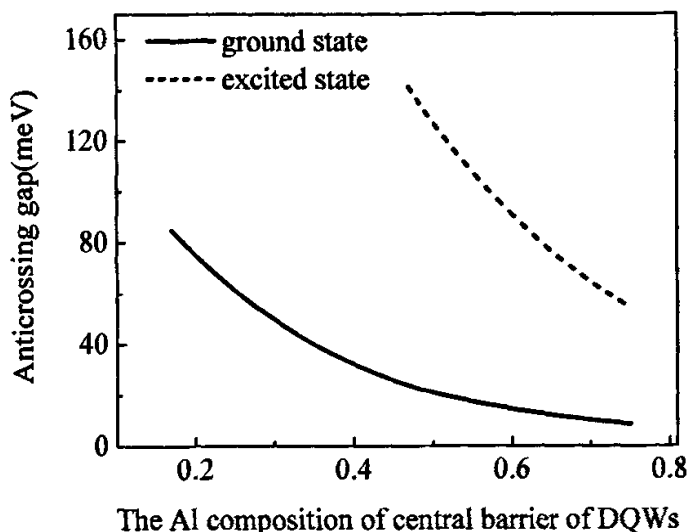


图31 双量子阱的中间耦合势垒层中Al组份对基态和激发态的anticrossing gap的影响；插图是极化场不连续对基态和激发态的anticrossing gap的影响。

正如第三章所述, $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层中Al组份的增加将导致中间耦合势垒高度的增加, 同时也导致势阱和中间耦合势垒层之间的极化场不连续的增加。因为极化场不连续对anticrossing gap几乎没有影响, 因此 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层中Al组份对anticrossing gap的影响可以被看作是中间耦合势垒层的势垒高度对anticrossing gap的影响。随着中间耦合势垒层中Al组份的增加, 中间耦合势垒层相对于基态和激发态子带的势垒高度也增加。因此, anticrossing gap随中间耦合势垒高度的增加而减小。由于中间耦合势垒层相对于基态子带对的势垒高度总是大于其相对于激发态子带对的势垒高度, 因此在图28、30~33中, $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的基态子带对的anticrossing gap总是小于激发态子带对的anticrossing gap。

4.5 中间耦合势垒层厚度的影响

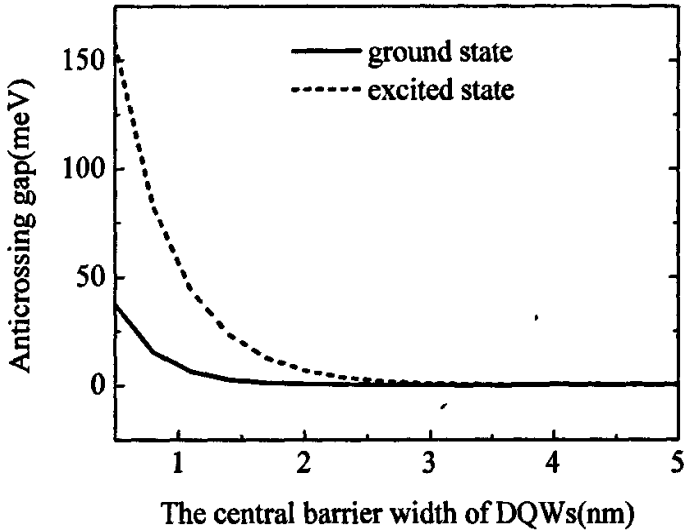


图32 双量子阱的中间耦合势垒层的厚度对基态和激发态的anticrossing gap的影响。

图32表示 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的中间耦合势垒层厚度对其子带对之间的 anticrossing gap 的影响, 其计算结构与4.3节不同的是其中间耦合势垒层的厚度是变

化的，中间耦合势垒层的厚度 L_{cb} 的变化范围是从0到5nm，极化场不连续和势垒层掺杂浓度与4.4节一致。图中实线表示耦合双量子阱的基态子带对的anticrossing gap，虚线表示激发态子带对的anticrossing gap。从图32中可以看到，无论是基态子带对还是激发态子带对的anticrossing gap都随中间耦合势垒层厚度的增加急剧减小。和图31相比可知，增加中间耦合势垒层的厚度对双量子阱中子带对的anticrossing gap的影响要比增加中间耦合势垒高度的影响大得多。当中间耦合势垒层的厚度为2nm时，子带对的anticrossing gap很小，几乎为0。这表明仅当中间耦合势垒层的厚度小于2nm时，双量子阱中子带对之间才有明显的耦合；也可说仅当中间耦合势垒层的厚度小于2nm时，双量子阱的两个量子阱之间才有明显的耦合。

4.6 对称双量子阱阱宽的影响

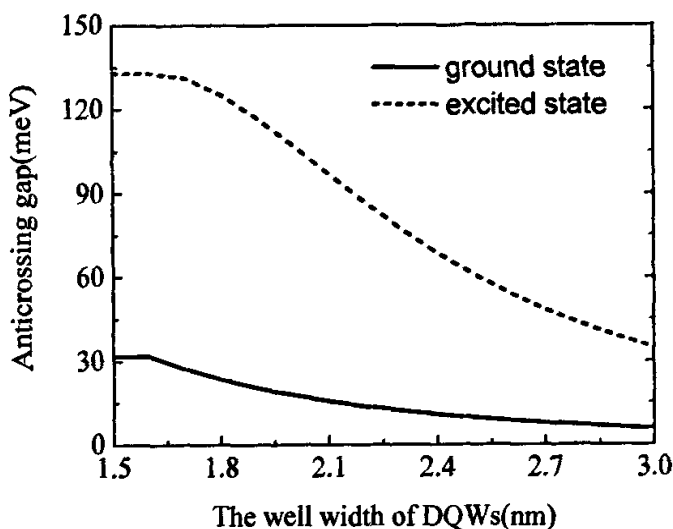


图 33 结构对称的双量子阱的阱宽对基态和激发态的 anticrossing gap 的影响。

图 33 表示结构对称的 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的阱宽对 anticrossing gap 的影响，其计算结构与 4.3 节不同的是双量子阱的阱宽是变化的，势阱宽度 L_w 的变化范围是从 1.5 到 3.0nm，极化场不连续和势垒层掺杂浓度与 4.4 节一致。图中实线表示基态子带对之间的 anticrossing gap，虚线表示激发态子带对之间的 anticrossing

gap。图中基态和激发态子带对的 anticrossing gap 随 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的阱宽的增加而减小。随着量子阱的加宽，子带的能量位置将下降，势垒层相对于子带的势垒高度将变高，从而量子阱的加宽等价于中间耦合势垒层的增高。因此，双量子阱的阱宽对其子带对之间的 anticrossing gap 的影响等价于中间耦合势垒层的高度对子带对之间的 anticrossing gap 的影响。由于子带对之间的 anticrossing gap 随中间耦合势垒层高度的增加而减小，所以子带对之间的 anticrossing gap 随双量子阱的阱宽的增加而减小。

本章小结

本章利用加外电场的方法系统地研究了 anticrossing 现象以及极化场不连续和双量子阱的结构参数对 anticrossing gap 的影响。由于 GaN 基半导体材料具有大的极化效应，从而导致 $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的两个量子阱之间具有大的电势降落，以及其中的子带也将发生 Stark shift。对于具有对称结构的双量子阱，两个量子阱中的基态和激发态原本应该发生共振隧穿、并具有对称的波函数分布和对称的导带结构，由于极化场的出现和 Stark shift，基态子带对之间或激发态子带对之间的能量间距变大，共振被解除，每个子带的波函数由在两个量子阱中都有分布变为主要分布在其中一个量子阱中。通过加外电场的方法可以调节两个量子阱中子带对之间的能量间距，从而使子带对之间重新发生共振。正是由于子带对之间的共振，随着外加电场的变化，子带对不会发生交叉，也就是说子带对之间的能量间距不会为 0，此即 anticrossing 现象，子带对之间的能量间距具有有限的最小值，这个有限的最小值就是 anticrossing gap。本章同时也从理论上对 anticrossing 现象进行了解释，理论上当子带对之间的能量间距变小时，它们之间的相互作用变大，这种相互作用在量子力学上可以产生微扰势，由于微扰作用使得子带对的能量重新分配。对于原本具有相同能量的子带对，耦合时相互作用和微扰势最大，这个微扰势使得原本简并的子带对分裂成两个具有不同能量的子带，此时这两个子带之间的能量间距就是 anticrossing gap。Anticrossing gap 的大小依赖于双量子阱的各个参数，本章计算了极化场不连续、中间耦合势垒层中的 Al 组份、中间耦合势垒层的厚度和量子阱的宽度对 anticrossing gap 的影响。发现界面处的极化场不连续对

anticrossing gap几乎没有影响，极化场不连续和外加电场共同作用的结果是改变了势垒层和势阱的形状，这表明势垒层和势阱的形状对anticrossing gap几乎没有影响；而随着量子阱宽度的增加，量子阱中子带的位置将下降，这相当于相对于子带的势垒高度增加了，因此，量子阱的宽度对anticrossing gap的影响最终可归结为中间耦合势垒层高度对anticrossing gap的影响；由于中间耦合势垒层中Al组份的增加将导致中间耦合势垒层高度的增加，同时也导致中间耦合势垒层和势阱之间界面处的极化场不连续的增加，由于极化场不连续对anticrossing gap几乎没有影响，因此anticrossing gap随中间耦合势垒层高度的增加而减小；Anticrossing gap随中间耦合势垒层厚度的增加而急剧减小，当中间耦合势垒层厚度大于2nm时，anticrossing gap几乎为0。Anticrossing gap可以用来衡量双量子阱的两个量子阱之间的耦合程度。从以上的讨论可知，两个量子阱之间的耦合程度主要取决于相对于量子阱中子带对的中间耦合势垒层的高度和厚度，另外，仅当中间耦合势垒层厚度小于2nm时，双量子阱的两个量子阱之间才有明显的耦合。

第五章 三能级或四能级系统的非对称

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的设计

5.1 引言

从第三章我们看到，由于GaN基材料中存在大的极化效应， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的两个量子阱之间出现一个大的电势降落，同时双量子阱中奇偶序子带之间出现Stark shift，从而相应的奇偶序子带之间的共振被解除，奇序子带波函数主要分布在左边量子阱中，偶序子带波函数主要分布在右边量子阱中，这样奇序子带波函数和偶序子带波函数之间的重叠大大减少，这使得从奇序子带到偶序子带（或从偶序子带到奇序子带）的子带间跃迁吸收系数大大减少，因此将不利于三能级或四能级系统的实现。本章通过固定左边量子阱，变化右边量子阱宽度来调节偶序子带的位置，从而调节相应的奇偶序子带之间的相对位置，当相应的奇偶序子带具有相同的位置时它们之间将重新发生共振，共振的子带波函数由主要分布在其中一个量子阱中变成在两个量子阱中都有分布，这样奇序子带和偶序子带之间又重新具有大的波函数重叠及大的子带间跃迁吸收系数，从而有利于三能级或四能级系统的实现。

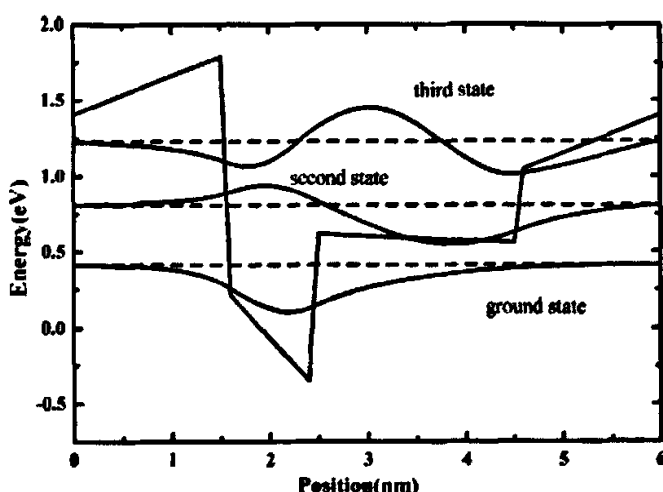


图34 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 梯形量子阱的导带结构和波函数分布图

图34是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 阶梯形量子阱的导带结构和波函数分布图[120]。它主要是利用基态到第二子带(1-2)和基态到第三子带(1-3)的跃迁来实现三能级的双色光电子器件的。而在我们的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中主要是利用 1_{odd} 子带到 2_{odd} 子带(或 1_{even} 子带到 2_{odd} 子带)和 1_{odd} 子带到 2_{even} 子带之间的跃迁来实现三能级(或四能级)的双色光电子器件的。在同样Al组份的情况下,双量子阱的 1_{odd} 子带和 2_{odd} 子带之间(或 1_{even} 子带和 2_{odd} 子带之间)的能量间距比阶梯形量子阱中1子带和2子带之间的能量间距大,因此与阶梯形量子阱相比,双量子阱可以比较容易地获得更短的子带间跃迁波长。另外我们可以在量子阱宽变化范围不太大的情况下自由调节 2_{odd} 子带和 2_{even} 子带之间的能量间距和子带间跃迁吸收系数。由绪论我们可以知道GaN的LO声子能量是88meV,当子带间能量间距大于LO声子能量的时候,子带间弛豫时间随着子带间能量间距的增大而增大,因此我们可以调节 2_{odd} 子带和 2_{even} 子带之间的能量间距并使其比GaN的LO声子能量大得不太多,这样可以得到尽可能短的弛豫时间或尽可能快的双波长之间的转换速度[121];此外我们也可以自由的调节 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁(或 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁)吸收系数和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数的相对大小,从而可以使得 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁(或 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁)和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁具有差不多大小的吸收系数,这样非常有利于三能级或四能级超快双色光电子器件的实现。

5.2 三能级非对称双量子阱的设计

图 35 给出了非对称 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的右边量子阱宽度对从基态到激发态的子带间跃迁吸收系数的影响。非对称双量子阱的结构是 10 nm $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/1.63$ nm GaN/ 1 nm $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/l_{\text{rw}}$ nm GaN/ 10 nm $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}$, 其中右边量子阱宽度的变化范围是从 1.55 到 2.55nm, 势垒层和量子阱之间界面处的极化场不连续为 2MV/cm, 中间耦合势垒层和量子阱之间界面处的极化场不连续为 1.76MV/cm, 势垒层掺杂浓度为 $5.0 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。其子带按能量从小到大依次为 1_{odd} 子带、 1_{even} 子带、 2_{odd} 子带和 2_{even} 子带。从图中可以看到 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱的加宽而减小, 当右边量子阱宽度小于 2.28nm 的时候, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱的加宽而增加。当右边量子阱宽度是

1.91nm 的时候, $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数相交, 也就是说当右边量子阱宽度为 1.91nm 的时候, $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁具有差不多相同大小的吸收系数; 当右边量子阱宽度大于 2.28nm 的时候, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱的加宽而减小, 同时 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱的加宽而增大。当右边量子阱宽度是 2.77nm 的时候, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数相交, 也就是说当右边量子阱宽度为 2.77nm 的时候, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁具有差不多相同大小的吸收系数。

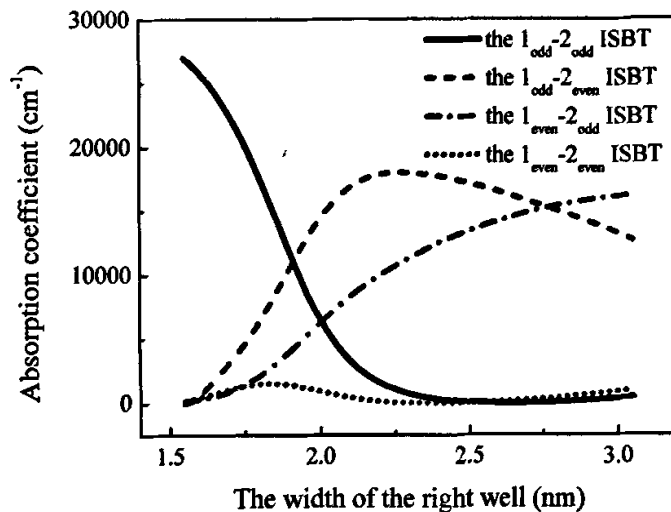


图 35 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的右边量子阱宽度对从基态到激发态的子带间跃迁吸收系数的影响。

正如第三章第四章所述, 和加外电场一样, 变化双量子阱的一个量子阱宽度也可以起到调节奇偶子带之间的相对位置, 从而调节他们之间相互作用的大小以及子带波函数在双量子阱中的分布。起初当右边量子阱宽度小于或等于左边量子阱宽度时, 偶序子带位置高于奇序子带位置, 而且奇序子带波函数和偶序子带波函数分别主要分布在左边量子阱和右边量子阱中。随着右边量子阱的加宽, 其中的偶序子带位置随之下降, 偶序子带相对于奇序子带的位置也随之下落, 基态子带对之间的能量差和激发态子带对之间的能量差也随之减小。由于子带对的

anticrossing 现象, 随着右边量子阱的加宽, 奇序子带波函数逐渐从左边量子阱隧穿到右边量子阱中, 而偶序子带波函数却逐渐从右边量子阱隧穿到左边量子阱中。加外电场可以使同一量子阱中的基态子带和激发态子带具有相同的 Stark shift, 与加外电场调节子带的位置不同, 由量子力学可知, 同一量子阱中的激发态子带位置随着量子阱宽度的变化比其中的基态子带大。当右边量子阱宽度的变化范围是从 1.55 到 2.55nm 时, 右边量子阱中的基态子带位置变化相对较小, 而激发态子带位置变化相对较大, 从而右边量子阱中的基态子带位置始终高于左边量子阱中的基态子带位置, 而右边量子阱中的激发态子带位置从高于左边量子阱中的激发态子带位置变为低于左边量子阱中的激发态子带位置。从而双量子阱中的基态子带对不会发生 anticrossing 现象, 而激发态子带对会发生 anticrossing 现象。因此当右边量子阱宽度的变化范围在 1.55nm 和 2.55nm 之间时, 1_{odd} 子带波函数始终主要分布在左边量子阱中, 1_{even} 子带波函数始终主要分布在右边量子阱中, 而 2_{odd} 子带波函数随着右边量子阱的加宽而逐渐从左边量子阱隧穿到右边量子阱中, 2_{even} 子带波函数随着右边量子阱的加宽而逐渐从右边量子阱隧穿到左边量子阱中。这使得 1_{odd} 子带波函数和 2_{odd} 子带波函数的重叠随着右边量子阱的加宽而减小, 1_{odd} 子带波函数和 2_{even} 子带波函数的重叠随着右边量子阱的加宽而增加, 同时 1_{even} 子带波函数和 2_{odd} 子带波函数的重叠也随着右边量子阱的加宽而增加。另一方面, 随着右边量子阱的加宽, 1_{even} 子带和 1_{odd} 子带之间的能量差减小, 根据费米分布函数, 1_{odd} 子带上的载流子占据概率和 1_{even} 子带上的载流子占据概率之差减小, 从而 1_{odd} 子带上的 2D 电子浓度随着右边量子阱的变宽而减少, 1_{even} 子带上的 2D 电子浓度随着右边量子阱的变宽而增加。由第三章可知, 在我们所计算的双量子阱中, 子带间跃迁吸收系数主要由初态子带上的载流子占据数、初末态子带间波函数之间的重叠和洛伦兹线形函数决定, 而子带间跃迁吸收系数的变化则主要由基态子带上载流子占据数的变化和初末态子带波函数之间重叠的变化引起。因此, $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随着 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的右边量子阱宽度的增加而减小; $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱宽度的增加而增大; 对于 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数, 引起它变化的两个因素中, 波函数的重叠增加, 而 1_{odd} 子带上的载流子占据数却减小, 当右边量子阱宽度小于 2.28nm 的时候, 波函数重叠的增加是主要的, 因而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱宽度

的增加而增加,当右边量子阱宽度为 1.91nm 时,它和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数相交;当右边量子阱宽度大于 2.28nm 的时候, 1_{odd} 子带上载流子占据数的减小是主要的,因而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱宽度的增加而减小,当右边量子阱宽度为 2.77nm 时,它和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数相交。

图 36 给出了图 35 左边交点处的非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数分布图,其计算结构、各个界面处的极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图 35 一致,双量子阱的右边量子阱宽度是 1.91nm。从图中可以看到, 1_{odd} 子带波函数和 1_{even} 子带波函数主要分布在左边量子阱和右边量子阱中,而 2_{odd} 子带波函数和 2_{even} 子带波函数在两个量子阱中都有分布。图 37 是该非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的子带间跃迁吸收系数。从图中可以看到 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数比较小,而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数却比较大,并且 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁具有差不多相同大小的吸收系数。另外, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长分别是 1.3 和 1.54 μm 。

当 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的右边量子阱的宽度是 1.91nm 时,激发态子带对之间的能量差最小,此时它们之间的相互作用最强,两个激发态子带波函数在两个量子阱中具有相同的分布,这说明了在 2_{odd} 子带或在 2_{even} 子带上的电子位于左右量子阱中的概率各为 50%。每个基态子带波函数和激发态子带波函数的重叠(1_{odd} 子带和 2_{odd} 子带、 1_{odd} 子带和 2_{even} 子带、 1_{even} 子带和 2_{odd} 子带、 1_{even} 子带和 2_{even} 子带)差不多相等,但是 1_{even} 子带与 1_{odd} 子带的能量差为 90meV,从而 1_{odd} 子带上的载流子占据数远大于 1_{even} 子带上的载流子占据数,因此在图 37 中 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数比较大,而 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数却比较小。当右边量子阱的宽度是 1.91nm 时, $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁具有差不多相同大小的吸收系数,这有利于三能级双色光电子器件的实现;并且 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁的吸收系数峰值的横坐标分别是 1.3 和 1.54 μm ,这两个波长处于光纤通信波段;另外,激发态子带对之间的能量差为 140meV,这个能量差比 GaN 量子阱的 LO 声子能量大,由于电声子相互作用,这使得 2_{even} 子带上的电子能够很快的弛豫到 2_{odd} 子带上,进而使得双量子阱中两个波长之间的转换速度很快,这有

利于超快开关的实现。

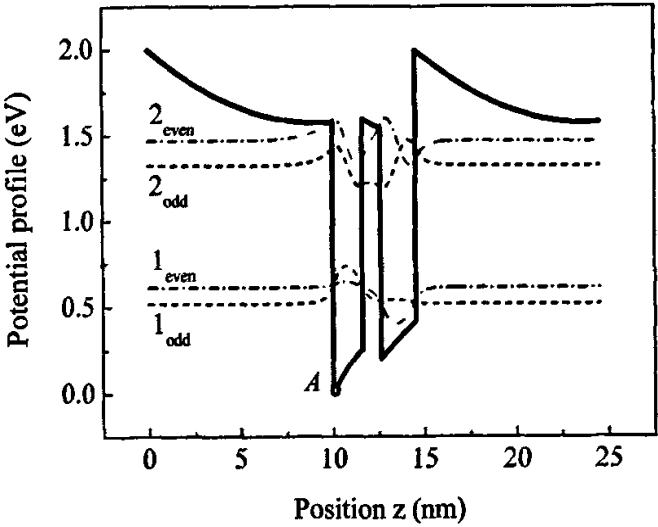


图 36 非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的导带结构和波函数分布图。

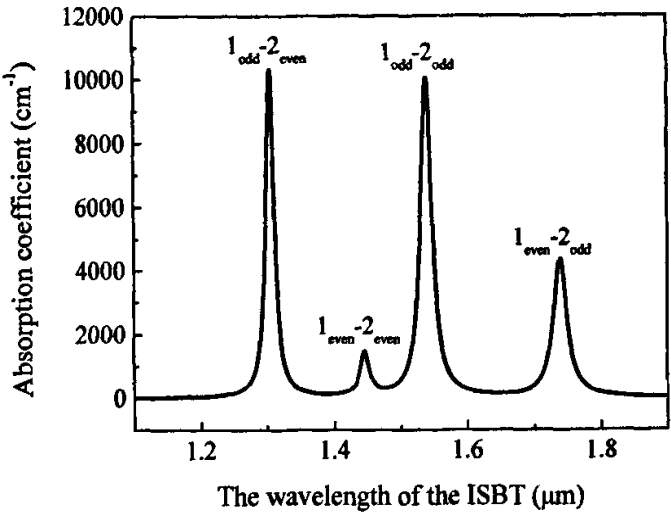


图 37 非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的子带间跃迁吸收系数。

图 38 给出了非对称 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的左边量子阱宽度对从基态到激发态的子带间跃迁吸收系数的影响。非对称双量子阱的结构是 10 nm

$\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/1.63\text{ nm GaN}/1\text{ nm Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}/l_{rw}\text{ Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}/10\text{ nm Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}$ ，其结构与图 35 不同的是右边量子阱是 $\text{Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ ，另外右边量子阱宽度的变化范围是从 2.3 到 3.3nm，体势垒层和左边量子阱之间界面处的极化场不连续为 2MV/cm，其余界面处的极化场不连续可以根据各个势垒层具有相同弛豫程度的假设得到，势垒层掺杂浓度为 $5.0\times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。其子带按能量从小到大依次为 1 子带、2 子带和 3 子带。1-2 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱宽度的增加而减小，1-3 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱宽度的增加而增大，1-2 子带间跃迁吸收系数和 1-3 子带间跃迁吸收系数相交于 2.6nm 宽的右边量子阱。

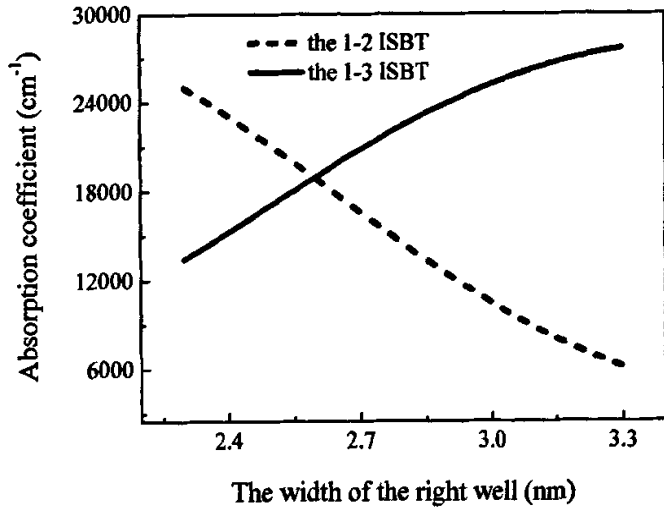


图 38 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的右边量子阱宽度对从基态到激发态的子带间跃迁吸收系数的影响。

在图 36 中，利用非对称双量子阱来实现三能级系统时，其中的 1_{even} 子带几乎没有什么用处，为了在实验上降低材料生长的难度，我们利用了 $\text{Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ 作为右边量子阱层的材料，这样降低了 $\text{Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ 量子阱层和 $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ 中间耦合势垒层以及 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}$ 体势垒层的晶格失配度，从而使得材料生长更容易。起初当右边量子阱宽度为 2.3nm 的时候，2 子带波函数和 3 子带波函数分别主要分布在左边量子阱和右边量子阱中，而且右边量子阱中的 3 子带位置比左边量子阱中的 2 子带位置高。和图 35 中情况一致，随着右边量子阱的加宽，其中的 3 子带位置随

之下降，从而 3 子带和 2 子带之间的能量差也随之减小，它们之间的相互作用增强。正如第四章所述的 anticrossing 效应，3 子带波函数随着右边量子阱的加宽而逐渐从右边量子阱移向左边量子阱中，2 子带波函数随着右边量子阱的变宽而逐渐从左边量子阱移向右边量子阱中，而 1 子带波函数在右边量子阱宽度变化的整个范围内都只在左边量子阱中有分布。这样 1 子带波函数和 3 子带波函数的重叠随着右边量子阱的变宽而增大，1 子带波函数和 2 子带波函数的重叠随着右边量子阱的变宽而减小。由于 1-2 子带间跃迁和 1-3 子带间跃迁具有相同的初态，这使得 1-2 子带间跃迁和 1-3 子带间跃迁具有相同的初态载流子占据数，因而在这里子带间跃迁吸收系数的变化主要由初末态子带波函数的重叠决定。因此，1-2 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱的加宽而减小，1-3 子带间跃迁吸收系数随着右边量子阱的加宽而增大，当右边量子阱宽度为 2.6nm 时，1-2 子带间跃迁吸收系数和 1-3 子带间跃迁吸收系数相交。

图 39 给出了图 38 交点处的非对称 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构和波函数分布图，其计算结构、各个界面处的极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图 38 一致，双量子阱的右边量子阱宽度是 2.6nm。从图中可以看到，1 子带波函数主要分布在左边量子阱中，而 2 子带波函数和 3 子带波函数在两个量子阱中都有分布。图 39 是该非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的子带间跃迁吸收系数。从图中可以看到，1-3 子带间跃迁和 1-2 子带间跃迁具有差不多相等的吸收系数，并且 1-3 子带间跃迁波长和 1-2 子带间跃迁波长分别是 1.41 和 1.51 μm 。

在图 38 中 1-2 子带间跃迁吸收系数和 1-3 子带间跃迁吸收系数的交点处，也就是当 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的右边量子阱的宽度是 2.6nm 时，2 子带和 3 子带之间的能量差很小，此时它们之间的相互作用很强，从而 2 子带和 3 子带在两个量子阱中具有相同的分布（见图 39），也就是说在 2 子带或在 3 子带上的电子位于左右量子阱中的概率各为 50%。这使得 1 子带与 2 子带之间具有和 1 子带与 3 子带之间相同的波函数重叠。因此在图 40 中 1-2 子带间跃迁吸收系数和 1-3 子带间跃迁吸收系数具有相同大小的峰值，这有利于三能级双色光电子器件的实现；并且 1-3 子带间跃迁和 1-2 子带间跃迁的吸收系数峰值的横坐标分别是 1.41 和 1.51 μm ，1.51 μm 处于光纤通信波段。

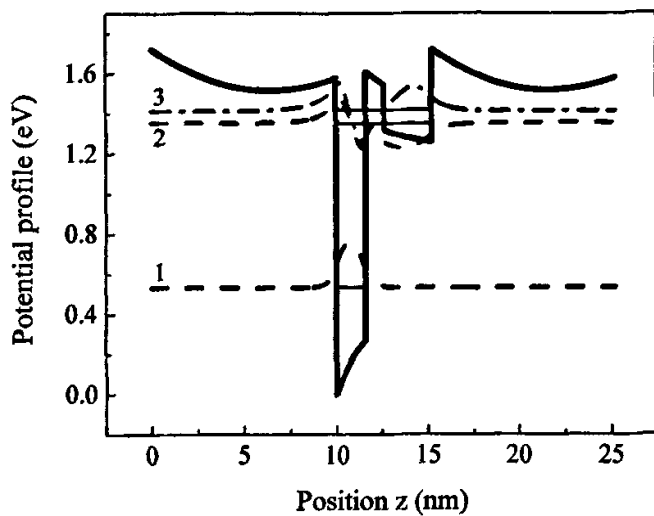


图 39 非对称 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的导带结构和波函数分布图。

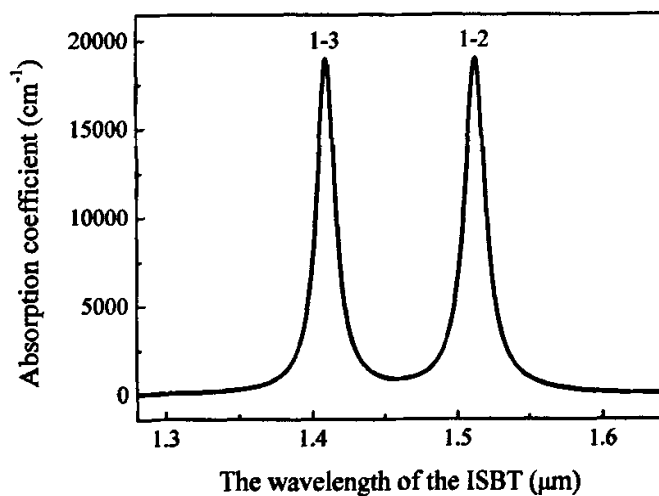


图 40 非对称 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的子带间吸收系数。

5.3 四能级非对称双量子阱的设计

图 41 给出了图 35 右边交点处的非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构

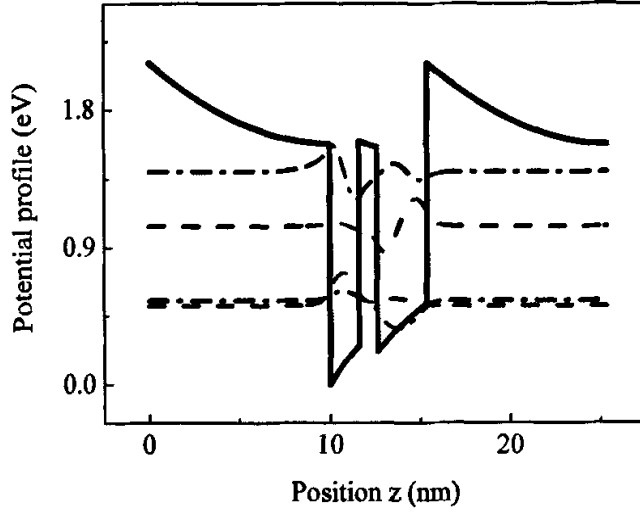


图 41 非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的导带结构和波函数分布图。

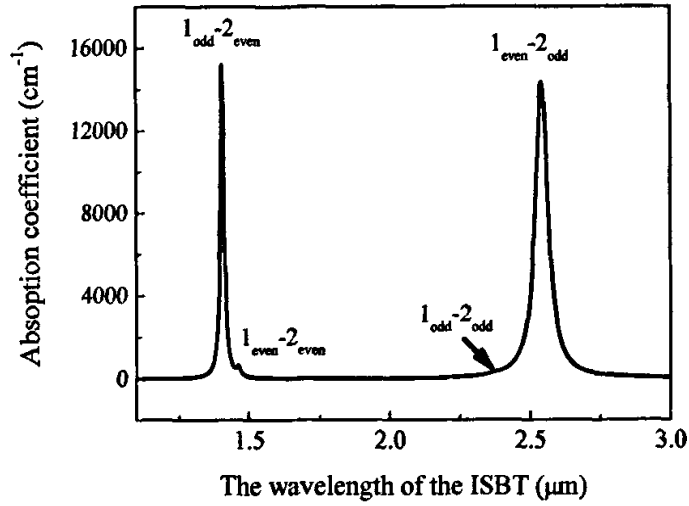


图 42 非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的子带间跃迁吸收系数。

和波函数分布图，其计算结构、各个界面处的极化场不连续和势垒层掺杂浓度与图 35 一致，双量子阱的右边量子阱宽度是 2.77nm 。从图中可以看到， 1_{odd} 子带波函数和 2_{even} 子带波函数主要分布在左边量子阱中，而 1_{even} 子带波函数和 2_{odd} 子带

波函数主要分布在右边量子阱中。图 42 是该非对称 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的子带间跃迁吸收系数。从图中可以看到 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数比较小，而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数却比较大。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁波长和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁波长分别是 1.41 和 $2.54\mu\text{m}$ 。

当 $\text{Al}_{0.85}\text{Ga}_{0.15}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱的右边量子阱的宽度是 2.77nm 时，由于 anticrossing 现象以及电子波函数的隧穿， 2_{odd} 子带波函数由起初主要分布在左边量子阱中变为主要分布在右边量子阱中， 2_{even} 子带波函数由起初主要分布在右边量子阱中变为主要分布在左边量子阱中。由于变化量子阱宽度对基态子带位置的影响较小，而且双量子阱的基态子带对之间的 anticrossing gap 很小，基态子带对之间的能量差很小，但没有小到足以发生共振隧穿的程度，因而 1_{odd} 子带波函数和 1_{even} 子带波函数分别主要分布在左边量子阱和右边量子阱中。这样 1_{odd} 子带波函数和 2_{even} 子带波函数之间的重叠以及 1_{even} 子带波函数和 2_{odd} 子带波函数之间的重叠较大，而 1_{odd} 子带波函数和 2_{odd} 子带波函数之间的重叠以及 1_{even} 子带波函数和 2_{even} 子带波函数之间的重叠较小。此时 1_{odd} 子带和 1_{even} 子带之间的能量差很小，和 KT 差不多大，因而 1_{odd} 子带和 1_{even} 子带具有差别不大的载流子占据数，从而子带间跃迁吸收系数的大小主要由波函数重叠的大小决定。因此 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数比较小，而 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数却比较大。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数峰值处的横坐标分别是 1.41 和 $2.54\mu\text{m}$ 。这有利于我们利用中红外波长来控制近红外波长。

本章小结

本章通过研究右边量子阱宽度对子带间吸收系数的影响来选择实现三能级或四能级系统的右边量子阱宽度。由于 GaN 基材料具有很强的极化效应，这使得 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的两个量子阱之间出现一个电势降落，由于极化感应电场引起的 Stark shift，其中子带对的电子波函数之间很难发生共振，从而使得子带波函数仅分布在其中一个量子阱中，这不利于三能级或四能级双量子阱的实现。为

了利用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱来实现三能级或四能级系统，我们必须使双量子阱中的子带对之间重新发生共振，从而使得共振子带对的波函数在两个量子阱中都有分布。使子带对之间重新发生共振的方法有两种：一种是加外电场，另一种是变化其中一个量子阱的宽度。在本章中我们用的是变化右边量子阱宽度的方法来调节其中的子带位置，以及它和另一量子阱中相应的子带之间的能量间距，从而控制双量子阱中子带对之间的共振、子带波函数的分布、初末态子带波函数的重叠和子带间跃迁吸收系数。当两个子带间跃迁吸收系数具有交点时，则在该交点处的双量子阱可以用来实现双色光电子器件，这两个子带间跃迁与三个子带有关则为三能级系统，这两个子带间跃迁与四个子带有关则为四能级系统。当双量子阱的两个量子阱都是GaN层时，变化右边量子阱的宽度既可以实现三能级系统又可以实现四能级系统，并且激发态子带对之间的能量间距大于GaN材料的LO声子能量，这使得电子在激发态子带对之间的弛豫时间非常短，从而使得双量子阱的两个子带间跃迁波长之间的转换速度非常快，另外大的导带不连续使得该双量子阱中的子带间跃迁波长处于光纤通信波段，从而有利于实现工作于光纤通信波段的光电子器件。对于两个量子阱都是GaN层的三能级双量子阱，其中的 1_{even} 子带没有什么用处，为了在降低材料生长的难度的同时获得三能级系统，我们提出了用 $\text{Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ 来代替右边量子阱的GaN，由于 $\text{Al}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ 与势垒层的晶格失配不如GaN与势垒层的晶格失配大，从而降低了材料生长的难度，用该量子阱同样可以获得工作于光纤通信波段的超快双色光电子器件。

第六章 全文总结

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱具有大的导带偏移、强的自发极化和压电极化效应、大的LO声子能量和大的电子有效质量。大的导带偏移有利于利用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱获得短波长的子带间跃迁，其子带间跃迁波长可达光纤通信波段，大的LO声子能量和大的电子有效质量有利于获得超快的载流子弛豫机制。因此， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱的子带间跃迁在光纤通信中有着广阔的应用前景，备受国际上关注。本文利用数值求解的方法研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中的子带间跃迁。研究内容和主要研究结果简要介绍如下：

第一章主要介绍了GaN基材料的基本特征， $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱中子带间跃迁的优势，应用前景等。另外还介绍了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 量子阱子带间跃迁的发展历史、研究现状及存在的问题。

第二章主要介绍了研究方法，本文采用的是自洽求解一维单电子薛定谔方程和泊松方程的研究方法。由于半导体是一个多电子体系，并且半导体中的电子密度远小于金属中的电子密度，为了补偿单电子近似所带来的误差，在势能项中加入了由泡利不相容原理和电子之间的库伦相互作用所引起的交换关联势。为了方便计算，采用极化场不连续代替极化感应电场作为拟合参数进行数值计算。另外计算了子带间跃迁吸收系数，它主要由振子强度、初末态载流子占据差和洛伦兹线形函数所决定。本章也给出了计算模型，为了获得三能级和四能级系统，采用的量子阱结构是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 耦合双量子阱。

第三章主要研究了极化场不连续和双量子阱的结构参数对子带间跃迁波长、吸收系数和电子分布的影响。强的极化感应电场使得具有对称结构的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱的导带结构、波函数分布和电子分布变得不对称，两个量子阱之间出现一个大的电势降落，双量子阱中相应的子带对之间出现一个大的Stark shift，从而子带对之间的共振被解除，子带波函数主要分布在其中一个量子阱中。研究确认双量子阱中 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁的波长和吸收系数随着极化场不连续的增大而减小。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁的波长随着中间耦合势垒层Al组份的增加变化不明显，而吸收系数随该层Al组份的增加先变大后变小，当Al组份为0.45时，吸收系数具有最大值。 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁的波长随着耦合势垒层厚度的增加而增

加，而吸收系数却随着该层厚度的增加而减小。

第四章主要研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中极化场不连续和结构参数对量子阱中子带对的anticrossing gap的影响。确认极化场不连续对anticrossing gap几乎没有影响，而anticrossing gap随着中间耦合势垒层Al组份和厚度的增加而减小。当耦合势垒层厚度大于2 nm时，anticrossing gap接近为0，表明仅当该层厚度小于2 nm时，两个量子阱之间才有明显的耦合。

第五章主要研究了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中右边量子阱宽度对双量子阱中子带间跃迁吸收系数的影响，并以此来寻求可实现三能级或四能级的非对称双量子阱结构。确认随右边量子阱变宽， $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数变小，而 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁吸收系数变大。当右边量子阱宽度小于2.28 nm时，随量子阱变宽， $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数变大；当右边量子阱宽度大于2.28 nm时，随量子阱变宽，该吸收系数变小。因此，随右边量子阱变宽，不同子带间跃迁吸收系数存在两个交点，当 $1_{\text{odd}}-2_{\text{odd}}$ 和 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 子带间跃迁吸收系数相交时可实现三能级系统，当 $1_{\text{odd}}-2_{\text{even}}$ 和 $1_{\text{even}}-2_{\text{odd}}$ 子带间跃迁的吸收系数相交时可实现四能级系统。为了降低 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱材料的生长难度，提出了用 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 代替GaN作为右边量子阱的阱材料，可使左边量子阱中的激发态和右边量子阱中的基态发生共振，从而获得三能级系统。在以上所设计的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 双量子阱中，其子带间跃迁波长可分别位于1.3 μm 和1.55 μm 附近，从而可实现工作于光通信波段的超快双色光电子器件。

参考文献

- [1] M. A. Khan, M. S. Shur, J. N. Kuznia, Q. Chen, J. Burm, W. Schaff, *Appl. Phys. Lett.*, 1995, **66**, 1083.
- [2] M. A. Khan, Q. Chen, C. J. Sun, J. W. Yang, M. Blasingame, *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **68**, 514.
- [3] I. Akasaki, S. Sota, H. Sakai, T. Tanaka, M. Koike, H. Amano, *Electron. Lett.*, 1996, **32**, 1105.
- [4] H. J. Choi, J. C. Johnson, R. R. He, S. K. Lee, F. Kim, P. Pauzauskie, J. Goldberger, R. J. Saykally, P. D. Yang, *J PHYS CHEM B*, 2003, **107**, 8721.
- [5] S. Tanaka, S. Iwai, Y. Aoyagi, *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **69**, 4096.
- [6] B. Daudin, F. Widmann, G. Feuillet, Y. Samson, M. Arlery, J. L. Rouviere, *Phys. Rev B*, 1997, **56**, R7069.
- [7] A. D. Bykhovski, B. L. Gelmont, M. S. Shur, *J. Appl. Phys.*, 1997, **81**, 6332.
- [8] J. K. Sheu, J. M. Tsai, S. C. Shei, W. C. Lai, T. C. Wen, C. H. Kou, Y. K. Su, S. J. Chang, G. C. Chi, *IEEE Electr. Device L.*, 2001, **22**, 460.
- [9] Y. F. Zhang, J. Singh, *J. Appl. Phys.*, 1999, **85**, 587.
- [10] Y. Q. Deng, R. Kersting, J. Z. Xu, R. Ascazubi, X. C. Zhang, M. S. Shur, R. Gaska, G. S. Simin, M. A. Khan, V. Ryzhii, *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **84**, 70.
- [11] S. T. Sheppard, K. Doverspike, W. L. Pribble, S. T. Allen, J. W. Palmour, L. T. Kehias, T. J. Jenkins, *IEEE Electr. Device L.*, 1999, **20**, 161.
- [12] M. A. Khan, G. Simin, J. W. Yang, J. P. Zhang, A. Koudymov, M. S. Shur, R. Gaska, X. H. Hu, A. Tarakji, *IEEE T. MICROW. THEORY.*, 2003, **51**, 624.
- [13] C. A. Tran, A. Osinski, R. F. Karlicek, I. Berishev, *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**, 1494.
- [14] Y. B. Lee, T. Wang, Y. H. Liu, J. P. Ao, Y. Izumi, Y. Lacroix, H. D. Li, J. Bai, Y. Naoi, S. Sakai, *JPN. J. Appl. Phys. Part 1*, 2002, **41**, 4450.
- [15] S. Bader, B. Hahn, H. J. Lugauer, A. Lell, A. Weimar, G. Bruderl, J. Baur, D. Eisert, M. Scheubeck, S. Heppel, A. Hangleiter, V. Harle, *Phys. Status Solidi A*, 2000, **180**, 177.
- [16] M. Razeghi, A. Rogalski, *J. Appl. Phys.*, 1996, **79**, 7433.
- [17] L. Dobrzanski, A. Jagoda, K. Gora, K. Przyborowska, *Opto-Electron. Rev.*, 2002, **10**, 291.
- [18] V. I. Litvinov, V. K. Dugaev, *Phys. Rev. Lett.*, 2001, **86**, 5593.

- [19] S. J. Pearton, C. R. Abernathy, M. E. Overberg, G. T. Thaler, D. P. Norton, N. Theodoropoulou, A. F. Hebard, Y. D. Park, F. Ren, J. Kim, L. A. Boatner, *J. Appl. Phys.*, 2003, **93**, 1.
- [20] W. C. Johnson et al., *J. Phys. Chem.* 1932, **36**, 2561.
- [21] Y. F. Zhang, Y. Smorchkova, C. Elsass, S. Keller, J. Ibbetson, S. DenBaars, U. Mishra, J. Singh, *J. VAC. SCI. TECHNOL. B*, 2000, **18**, 2322.
- [22] I. Akasaki, H. Amano, S. Nagahama, T. Tanaka, M. Kaike, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, 1995, **34**, L1517.
- [23] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Nagahama, T. Yamada, T. Mukai, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, 1995, **34**, L1332.
- [24] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, Y. Sugimoto, H. Kiyoku, *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **69**, 3034.
- [25] G. E. Bulman, K. Doverspike, S. T. Sheppard, T. W. Weeks, H. S. Kong, H. M. Dieringer, J. A. Edmond, J. D. Brown, J. T. Swindell, J. F. Schetzina, *Electron. Lett.*, 1997, **33**, 1556.
- [26] Jeff, Hecht, *Laser Focus World*, 1993, **29**, 199.
- [27] S. Guha, N. A. Bojarczuk, *Appl. Phys. Lett.*, 1998, **72**, 415.
- [28] M. W. Fay, G. Moldovan, P. D. Brown, I. Harrison, J. C. Birbeck, B. T. Hughes, M. J. Uren, T. Martin, *J. Appl. Phys.*, 2002, **92**, 94.
- [29] S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh, *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **64**, 1687.
- [30] J. I. Pankove, *InGaN and Related Materials*, edited by S. J. Pearton (Gordon and Breach, New York), 1997, 1-9.
- [31] S. C. Binari, H. C. Dietrich, *InGaN AND Related Materials*, edited by S. J. Pearton (Gordon and Breach, New York), 1997, 509-534.
- [32] I. Akasaki, H. Amano, *Tech. Dig. Int. Electron. Devices Meet*, 1996, **96**, 231.
- [33] 梁春广, 张冀, 《半导体学报》, 1999, **20**, 89.
- [34] 将荣华, 肖顺珍, 李艳, 《半导体技术》, 2000, **25**, 16.
- [35] G. Martin, S. Strite, A. Botchkaev, A. Agarwal, A. Rockett, H. Morkoc, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, *Appl. Phys. Lett.*, 1994, **65**, 610.
- [36] G. Martin, A. Botchkaev, A. Rockett, H. Morkoc, *Appl. Phys. Lett.*, 1996, **68**, 2541.
- [37] N. Maeda, T. Nishida, N. Kobayashi, *Appl. Phys. Lett.*, 1998, **73**, 1856.
- [38] Z. W. Zheng, B. Shen, R. Zhang, Y. S. Gui, C. P. Jiang, Z. X. Ma, G. Z. Zheng, S. L. Guo, Y. Shi, P. Han, Y. D. Zheng, T. Someya, Y. Arakawa, *Phys. Rev. B*, 2000, **62**,

R7739.

- [39] K. Kim, W. R. L. Lambrecht, B. Segall, *Phys. Rev. B*, 1997, **56**, 7018.
- [40] R. Juza, and H. Hahn, *Anorg. Allgem. Chem.*, 1940, **244**, 133.
- [41] W. J. Fan, M. F. Li, T. C. Chong, J. B. Xia, *J. Appl. Phys.*, 1996, **79**, 188.
- [42] L. Bellaiche, K. Kunc, J. M. Besson, *Phys. Rev. B*, 1996, **54**, 8945.
- [43] P. E. Van Camp, V. E. Van Doren, J. T. Devreese, *Phys. Rev. B*, 1991, **44**, 9056.
- [44] R. Juza, H. Hahn, *Anorg. Allgem. Chem.*, 1938, **234**, 282.
- [45] F. Bernardini, V. Fiorentini, *Phys. Rev. B*, 1997, **56**, R10024.
- [46] K. Tsubouchi, K. Sugai, N. Mikoshiba, *IEEE Ultrason. Symp.*, 1981, **1**, 375.
- [47] G. D. O'Clock, M. T. Duffy, *Appl. Phys. Lett.*, 1973, **23**, 55.
- [48] M. A. Littlejohn, J. R. Hauser, T. H. Glisson, *Appl. Phys. Lett.*, 1975, **26**, 625.
- [49] K. Shimada, T. Sota, K. Suzuki, *J. Appl. Phys.*, 1998, **84**, 4951.
- [50] K. Shimada, T. Sota, K. Suzuki, H. Okumura, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, 1998, **37**, L1421.
- [51] A. S. Barker, Jr and M. Ilegems, *Phys. Rev. B*, 1973, **7**, 743.
- [52] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt, *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **79**, 3958.
- [53] K. Tsubouchi, K. Sugai, N. Mikoshiba, *IEEE Ultrason. Symp.*, 1981, **1**, 375.
- [54] A. F. Wright, *J. Appl. Phys.*, 1997, **82**, 2833.
- [55] Y. Takagi, M. Ahart, T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, S. Nakamura, *Physica B*, 1996, **220**, 547.
- [56] A. V. Sheleg, V. A. Savastenko, *Neorg. Mater.*, 1979, **15**, 1598.
- [57] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, J. Hilsenbeck, *J. Appl. Phys.*, 1999, **85**, 3222.
- [58] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A. J. Sierakowski, W. J. Schaff, L. F. Eastman, *J. Appl. Phys.*, 2000, **87**, 334.
- [59] E. T. Yu, X. Z. Dang, L. S. Yu, D. Qiao, P. M. Asbeck, S. S. Lau, G. J. Sullivan, K. S. Boutros, J. M. Redwing, *Appl. Phys. Lett.*, 1998, **73**, 1880.
- [60] M. S. Shur, A. D. Bykhovski, R. Gaska, J. W. Yang, G. Simin, M. A. Khan, *Appl. Phys. Lett.* 2000, **76**, 3061.
- [61] B. Shen, T. Someya, Y. Arakawa, *Appl. Phys. Lett.*, 2000, **76**, 2746.
- [62] J. Faist, C. Sirtori, F. Capasso, D. L. Sivco, J. N. Baillargeon, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho, *IEEE Photonic. Tech. L.*, 1998, **10**, 1100.

- [63] O. Wada, *New J. Phys.*, 2004, **6**, 183.
- [64] G. Karunasiri, J. S. Park, J. Chen, R. Shih, J. F. Scheihing, M. A. Dodd, *Appl. Phys. Lett.*, 1995, **67**, 2600.
- [65] P. Y. Yu, M. Cardona, *Foudamentals of Semiconductors*, Springer, 2001, 135, 214, 470.
- [66] B. C. Lee, K. W. Kim, M. Dutta, M. A. Stroschio, *Phys. Rev. B*, 1997, **56**, 997.
- [67] B. K. Ridley, *Hot carriers in Semiconductor Nanostructures: Physics and Application*, edited by J. Shah (Academic Press, San Diego), 1992, 17.
- [68] J. S. Smith, L. C. Chui, S. Margalit, A. Yariv, A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1983, **1**, 376.
- [69] L. C. West, S. J. Eglash, *Appl. Phys. Lett.*, 1985, **46**, 1156.
- [70] N. Suzuki, N. Iizuka, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, 1997, **36**, L1006.
- [71] B. K. Ridley, *Phys. Rev. B*, 1989, **39**, 5282.
- [72] S. Strite, H. Morkoc, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1992, **10**, 1237.
- [73] T. Asano, S. Noda, T. Abe, A. Sasaki, *Abstr. Int. workshop on Femtosecond Technology, Tsukuba*, 1997, 98.
- [74] Y. Hirayama, J. H. Smet, L. H. Peng, C. G. Fonstad, E. P. Ippen, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1*, 1994, **33**, 890.
- [75] H. M. Ng, C. Gmachl, T. Siegrist, S. N. G. Chu, A. Y. Cho, *Phys. Status Solidi A*, 2001, **188**, 825.
- [76] N. Suzuki, N. Iizuka, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, 1998, **37**, L369.
- [77] N. Suzuki, N. Iizuka, K. Kaneko, *IEICE T. Electron.*, 2000, **E83C**, 981.
- [78] N. Suzuki, *IEICE T. Electron.*, 2002, **E85C**, 174.
- [79] N. Suzuki, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1*, 2003, **42**, 5607.
- [80] N. Suzuki, N. Iizuka, K. Kaneko, *IEICE T. Electron.*, 2005, **E88C**, 342.
- [81] N. Iizuka, N. Suzuki, *Compound Semiconductors 1998 Institute of Physics Conference Series*, 1999, **162**, 663.
- [82] N. Suzuki, N. Iizuka, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2*, 1999, **38** L363.
- [83] H. M. Ng, C. Gmachl, S. N. G. Chu, A. Y. Cho, *J. Cryst Growth*, 2000, **220**, 432.
- [84] K. Kishino, A. Kikuchi, H. Kanazawa, T. Tachibana, *Phys. Status Solidi A*, 2002, **192**, 124.
- [85] K. Kishino, A. Kikuchi, H. Kanazawa, T. Tachibana, *Appl. Phys. Lett.*, 2002, **81**, 1234.
- [86] I. Waki, C. Kumtornkittikul, Y. Shimogaki, Y. Nakano, *Appl. Phys. Lett.*, 2003, **82**,

4465.

- [87] T. Asano, S. Yoshizawa, S. Noda, N. Iizuka, K. Kaneko, N. Suzuki, O. Wada, *Opt. Quant. Electron.*, 2001, **33**, 963.
- [88] A. Ishida, Y. Inoue, H. Nagasawa, N. Sone, K. Ishino, J. J. Kim, H. Makino, T. Yao, H. Kan, H. Fujiyasu, *Physica E*, 2004, **21**, 765.
- [89] N. Iizuka, K. Kaneko, N. Suzuki, *Electron. Lett.*, 2004, **40**, 962.
- [90] H. Yoshida, T. Mozume, T. Nishimura, O. Wada, *Electron. Lett.* 1998, **34** 913.
- [91] T. Mei, G. Karunasiri, S. J. Chua, *Appl. Phys. Lett.*, 1997, **71**, 2017.
- [92] P. G. Huggard, C. J. Shaw, S. R. Andrews, J. A. Cluff, R. Grey, *Phys. Rev. Lett.*, 2000, **84**, 1023.
- [93] J. M. Li, J. J. Wu, X. X. Han, Y. W. Lu, X. L. Liu, Q. S. Zhu, Z. G. Wang,, *Semicond. Sci. Tech.*, 2005,**20**, 1207.
- [94] F. Stengel, S. N. Mohammad, H. Morkoc, *J. Appl. Phys.*, 1996, **80**, 3031.
- [95] A. Reale, G. Massari, A. Di Carlo, P. Lugli, A. Vinattieri, D. Alderighi, M. Colocci, F. Semond, N. Grandjean, J. Massies, *J. Appl. Phys.*, 2003, **93**, 400.
- [96] M. Zervos, A. Kostopoulos, G. Constantinidis, M. Kayambaki, A. Georgakilas, *J. Appl. Phys.*, 2002, **91**, 4387.
- [97] R. de Paiva, J. L. A. Alves, R. A. Nogueira, C. de Oliveira, H. W. L. Alves, L. M. R. Scolfaro, J. R. Leite, *Mat. Sci. Eng. B.*, 2002, **93**, 2.
- [98] D. Brunner, H. Angerer, E. Bustarret, F. Freudenberg, R. Hopler, R. Dimitrov, O. Ambacher, M. Stutzmann, *J. Appl. Phys.*, 1997, **82**, 5090.
- [99] C. M. Tan, J. M. Xu, S. Zukotynski, *J. Appl. Phys.*, 1993, **73**, 2921
- [100] P. N. Brounkov, T. Benyattou, G. Guillot, *J. Appl. Phys.*, 1996, **80**, 864
- [101] J. Nelson, I. Ballard, K. Barnham, J. P. Connolly, J. S. Roberts, M. Pate, *J. Appl. Phys.*, 1999, **86**, 5898.
- [102] X.Aymerich-Humet, F.Serra-Metres, J.Millan, *J. Appl. Phys.*, 1983, **54**, 2850.
- [103] L. Hedin, B. I. Lundqvist, *J. Phy. C*, 1971, **4**, 2064.
- [104] L. Brey, Jed Dempsey, N. F. Johnson, B. I. Halperin, *Phys. Rev. B*, 1990, **42**, 1240.
- [105] J. A. Garrido, J. L. Sanchez-Rojas, A. Jimenez, E. Munoz, F. Omnes, P. Gibart, *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**, 2407.
- [106] A. E. Ali, S. Klaus, *J. Appl. Phys.*, 1993, **74**, 3273.
- [107] D. Ahn, S. L. Chuang, *IEEE J. Quantum Elect.*, 1987, **QE23**, 2196.
- [108] R. Q. Yang, J. M. Xu, M. Sweeny, *Phys.Rev. B*, 1994, **50**, 7474.
- [109] Y. M. Huang, C. Lien, *J. Appl. Phys.*, 1995, **77**, 3433.

- [110] R. M. Chu, Y. D. Zheng, Y. G. Zhou, S. L. Gu, B. Shen, R. Zhang, R. L. Jiang, P. Han, Y. Shi, *Appl. Phys. A.*, 2003 **77** 669.
- [111] R. M. Chu, Y. G. Zhou, Y. D. Zheng, P. Han, B. Shen, S. L. Gu, *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **79**, 2270.
- [112] N. Suzuki, N. Iizuka, K. Kaneko, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1*, 2003, **42**, 132.
- [113] B. S. Williams, H. Callebaut, S. Kumar, Q. Hu, J. L. Reno, *Appl. Phys. Lett.*, 2003, **82**, 1015.
- [114] X. F. He, S. R. Ryu, W. J. Li, J. Haetty, A. Petrou, B. D. McCombe, W. Schaff, *Appl. Phys. Lett.*, 1997, **70**, 214.
- [115] B. S. Williams, B. Xu, Q. Hu, M. R. Melloch, *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**, 2927.
- [116] B. S. Williams, H. Callebaut, Q. Hu, J. L. Reno, *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **79**, 4444.
- [117] A. M. Tomlinson, C. C. Chang, R. J. Stone, R. J. Nicholas, A. M. Fox, M. A. Pate, C. T. Foxon, *Appl. Phys. Lett.*, 2000, **76**, 1579.
- [118] S. Tomic, E. P. O'Reilly, P. J. Klar, H. Gruning, W. Heimbrod, W. M. M. Chen, I. A. Buyanova, *Phys. Rev. B*, 2004, **69**, 245305.
- [119] M. Hetterich, A. Grau, A. Y. Egorov, H. Riechert, *J. Appl. Phys.*, 2003, **94**, 1810.
- [120] J. M. Li, Y. W. Lu, X. X. Han, J. J. Wu, X. L. Liu, Q. S. Zhu, Z. G. Wang, *Physica E*, 2005, **28**, 453.
- [121] C. Gmachl, S. V. Frolov, H. M. Ng, S. N. G. Chu, A. Y. Cho, *Electron. Lett.*, 2001, **37**, 378.

攻读博士期间发表和投递的论文

1. **S.Y.Lei**, B.Shen, L. Cao, F.J.Xu, Z.J.Yang, K.Xu, and G.Y.Zhang, "Influence of polarization-induced electric field on the wavelength and the absorption coefficient of the intersubband transitions in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum wells", Journal of Applied Physics, 2006, 99 (7): 074501.
2. **Lei Shuang-Ying**, Shen Bo, Zhang Guo-Yi, "Anticrossing gap between pairs of the subbands in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum wells", Chinese Physics Letters, 2006, 23 (2): 450-452.
3. **Lei Shuang-Ying**, Shen Bo, Zhang Guo-Yi, "Influence of polarization-induced electric field on subband structure in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum wells", Chinese Physics Letters, 2006, 23 (6): 1574-1577.
4. **S.Y.Lei**, B.Shen, F.J.Xu, Z.J.Yang, K.Xu, and G.Y.Zhang, "Influence of polarization-induced electric fields on the optical properties of intersubband transition in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum wells", Chinese Journal of Semiconductors, 2006, 27(3), 403-408.
5. **S.Y.Lei**, B.Shen, L.Cao, Z. J. Yang, K.Xu, and G.Y.Zhang, "Design and simulation of three- and four-energy-level $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum wells", submitted to Journal of Applied Physics.
6. **S.Y.Lei**, B.Shen, L.Cao, D.J.Chen, R.Zhang and Y.D.Zheng, "Influence of polarization-induced electric field on subband structure and electron distribution in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ double quantum wells", Proceeding of 13th Semi-Conducting and Insulating Materials Conference, Beijing, 2004.

致谢

本文是在沈波教授的悉心指导和亲切关怀下完成的，沈老师渊博的知识，缜密的科学思维和富于启发性的指导，给我以很大的帮助，使我能克服工作中的困难，顺利完成学位论文。另外，沈老师对工作生活中所遇到问题的严谨认真的态度也使我备受教益。我谨向他表示衷心的感谢和崇高的敬意。

在几年的工作和学习过程中，张国义、阎和平、章蓓、徐科、胡晓东、于彤军、秦志新、杨志坚、陈志忠、康香宁等各位老师都给了我很大的帮助，在此一并向他们表示诚挚的谢意。

在实验室的学习和工作中，我和周慧梅、胡成余、唐宁、王茂俊、许福军、鲁麟、王彦、商树萍、罗浩俊、陶春旻、曹亮、韩奎、黄森、许谏、贺小伟等许多同学结下了深厚的友谊，和这些同学一起度过了我一生中难以忘怀的时光，将给我留下美好的回忆。

最后，还要特别感谢我的母亲及家人对我无微不至的关怀，他们给了我巨大的精神动力。