

论 文 摘 要

量子阱超晶格结构材料,特别是应变量子阱超晶格结构材料是一种新型的人工改性材料,这种结构材料及相关器件的外延生长及物理研究一直是国际前沿研究领域。

气态源分子束外延生长技术(包括V族氢化物气态源分子束外延生长技术GSMBE和化学束外延生长技术CBE)是本世纪八十年代初发展起来的较新的外延生长技术,这种生长技术特别适合于生长含P或既含As又含P的Ⅲ-V族化合物半导体材料和器件。与固态源分子束外延(SSMBE)生长技术及金属有机物源化学汽相淀积技术(MOCVD)相比,由于气态源分子束外延生长技术具有很多SSMBE和MOCVD所不具备的优点,因此,深受各国重视。气态源分子束外延生长技术在我国的发展尚处于起步探索阶段。

InGaAs(P)/InP材料系统在光电子器件及微电子器件方面具有重要应用。(AlGa)InP/GaAs可见光激光器在军事和国民经济建设中具有广泛的应用前景。InGaAs/InP量子阱超晶格结构材料的研制及(AlGa)InP/GaAs可见光激光器结构材料的研制是我国的两项“863”高技术研究课题。本文工作围绕这两项研究课题,在实验上和理论上进行了深入细致地系统研究,取得以下主要结果。

一、InP/InP、In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP及In_{1-x}Ga_xAs、P_{1-y}/InP的GSMBE生长及特性研究

在国内首次研究了InP/InP及In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP、In_{1-x}Ga_xAs、P_{1-y}/InP异质结构材料的GSMBE生长方法及影响生长质量的各种因素,给出了外延生长结果,并对结果进行了分析讨论。首次系统研究了生长温度及V/Ⅲ比对GSMBE生长In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP质量的影响,生长出了达九十年代国际水平的In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP异质结构材料。所得到的结果对进一步生长InGaAs/InP量子阱材料及相关器件具有重要意义。

(1)生长匹配In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP异质结构材料的难点之一是精确控制In组分。我们以RHEED测试的生长速率曲线为依据,首次从理论上建立了In束源

炉温度变化与失配度变化之间的关系,以此关系为指导,生长出了失配度小于 10^{-3} 的异质结构材料。

(2)首次系统地研究了生长温度对 GSMBE $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 性质的影响,得到以下结论:当生长速率为 $1\text{ML}/\text{S}$ 、V 族氢化物裂解炉温度为 950°C 、 AsH_3 流量为 10sccm 时,生长温度选择范围应为 500°C 左右;高温生长有利于改善光致发光谱的半高宽。

(3)首次系统地研究了 V / III 比对 GSMBE $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 性质的影响,得到以下结论:当生长速率为 $1\text{ML}/\text{S}$,生长温度为 500°C 、V 族氢化物源裂解炉温度为 950°C 时, AsH_3 流量选择范围应为 $8 \sim 12\text{sccm}$,最佳 AsH_3 流量为 10sccm 。

(4)在国内首次用 GSMBE 方法生长出了高质量的达国际九十年代水平的 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构材料,其垂直失配度为 2.0×10^{-4} ;当厚度为 $1\mu\text{m}$ 时双晶 x 射线衍射峰的半高宽为 26 弧秒,接近该厚度下的理论极限值; 77K 时非掺杂电子浓度为 $5.5 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$,迁移率为 $45613\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{S}$,该迁移率数值超过了文献中所给出的用各种方法生长的 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构材料在相同非掺杂电子浓度下的迁移率。

(5)在国内首次用 GSMBE 方法对 $\text{InGaAsP}/\text{InP}$ 四元化合物半导体材料的生长进行了研究,所得样品的垂直失配度为 1.3×10^{-3} ,DCXRD 衍射峰半高宽为 129 弧秒; 10K PL 谱峰值波长为 $12280\text{\AA}$,半高宽为 11.0meV 。用 Auger 谱测定了所生长的四个样品中 P 的固相组份与气相组份之间的关系,所得结果与文献中报导的结果基本一致。

二、 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 匹配单量子阱材料及匹配多量子阱超晶格材料的光学特性研究

由于 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 系统含有两种 V 族元素,因此,生长高质量 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱结构材料的最大难点是选择合适的切换时序,以保证量子阱界面的组份突变性。我们对 GSMBE 生长过程进行了深入地分析研究,首次明确提出了非对称切换时序,用该时序成功地生长出了达九十年代国际水平的匹配 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱结构材料。

(1)因为 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱结构材料既含有 As 又含有 P,因此,获得高质量 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱材料的最大难点,是控制界面的组份突变

小于

性。我们对 GSMBE 外延生长 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱结构材料的过程进行了深入细致地分析研究,指出影响量子阱界面质量的两个主要因素是发生在间断生长过程中的置换效应和发生在生长过程中的 V 族元素转移效应(记忆效应)。详细地分析了两种效应对 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱界面原子排列及界面应变状态的影响,提出了量子阱界面最佳原子排列模型。在分析研究的基础上明确提出了改善量子阱界面质量的非对称切换方法。

影响,

(2)用非对称切换方法生长出了高质量的达国际水平的匹配单量子阱结构材料。对材料的低温光致发光谱测试结果表明,量子阱界面起伏小于 1 个分子单层(2.93 Å);当阱宽大于 40 Å 时,量子阱中激子跃迁能量与理论计算值及文献中给出的最好实验结果符合得很好;当阱宽小于 40 Å 时,量子阱中的激子跃迁能量的实验值小于理论计算值,但我们的实验值高于文献中给出的实验值。该生长结果证实了非对称切换方法的有效性。

1 时

寸非

(3)结合 GSMBE 生长过程,用组份台阶阱模型定性解释了窄阱中激子跃迁能量相对于理论计算值的红移现象。

超过

相同

(4)在国内首次用 GSMBE 方法生长了 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 匹配多量子阱超晶格结构材料,对其进行了双晶 x 射线衍射和低温及室温光致发光谱测试,确定出了超晶格的周期及量子阱中的激子跃迁能量。10K 光致发光谱半高宽为 6.9 ~7.7 meV,室温 PL 谱半高宽为 11.8 meV。显示出样品具有较高的质量和良好的周期性。在 DCXRD 曲线上可以看到 14 个卫星峰。

的

宽

谱

与

三、 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 应变量子阱超晶格材料 GSMBE 生长及特性研究

与 $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ 系统相比,国际上 InGaAs/InP 应变量子阱超晶格材料则研究得较少。这主要是由于生长 InGaAs/InP 应变量子阱超晶格材料,除了要想方设法消除失配位错的产生以实现共格生长外,还要降低 V 族元素 P_2 和 As_2 切换所带来的置换效应和记忆效应对量子阱界面的影响,因此, InGaAs/InP 应变量子阱超晶格材料更难生长。

.53

子

首

平

我们在国产第一台 CBE 系统上,用 GSMBE 技术在国内首次生长了各种结构和组份的应变量子阱超晶格材料,并对其生长和性能以及平面双轴应变对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱中的激子跃迁能量的影响进行了较为系统的研究。

失

与

(1)讨论了失配外延生长的特点,给出了单应变层、单量子阱及多量子阱超晶格材料临界厚度的概念及计算方法。对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 系统的临界厚度进行

了理论计算。

(2) 在一个衬底片上生长了具有不同阱宽 ($10\text{ \AA} \sim 110\text{ \AA}$) 的应变为 $+0.5\%$ 的单应变量子阱样品。对该样品的 10K 光致发光谱测试结果表明, $70\text{ \AA}$ 和 $90\text{ \AA}$ 阱的光致发光谱峰半高宽为 4.5meV , 显示了样品具有较高的质量。对该样品的变温光致发光谱测试结果表明, 量子阱中激子跃迁能量随温度的变化规律与体材料相同。

(3) 生长了阱宽为 $54\text{ \AA}$ 、垒宽为 $129\text{ \AA}$ 、周期数为 40、压应变为 0.4% 的多量子阱样品, 从其 DCXRD 衍射图上可以清晰地看到 21 个卫星峰。

(4) 生长了阱宽为 $50\text{ \AA}$ 、垒宽为 $200\text{ \AA}$ 的、阱层具有不同 In 组份 (因而具有不同应变) 的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 多量子阱 P-i-N 结构样品, In 组份变化范围为 $0.39 \sim 0.68$, 相应的应变变化范围为 $-1.0\% \sim +1.0\%$, 多量子阱的周期数为 20。对该系列样品进行了 DCXRD 测试, 用 x 射线衍射的运动学理论对 DCXRD 衍射图样进行了计算机模拟, 确定出了样品的结构参数和组份参数, 得到的结果与设计值符合得较好, 显示出了良好的对生长过程的可控制性。DCXRD 测试结果表明样品具有很好的质量。用低温 PL 谱、低温吸收谱及室温光伏谱对应变量子阱中的激子跃迁能量进行了测试, 测试结果互相吻合得较好且与理论计算结果基本符合。在室温下观察到了明显的激子吸收峰。在国内首次研究了平面双轴应变对应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱中激子跃迁能量的影响, 并首次从实验上观察到了 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 应变量子阱中 1H 激子吸收峰与 1L 激子吸收峰之间距离随 In 组份 (即平面双轴应变) 而变化的现象。

四、理论计算

从理论上全面系统地研究了量子尺寸效应, 合金组份效应及平面双轴应变效应三者对晶体能带结构及量子阱中激子跃迁能量的综影响。用统一的参数对匹配 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱及应变 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱中的激子跃迁能量进行了理论计算。详细地研究了平面双轴应变对半导体材料能带结构的影响。系统地计算了平面双轴应变对共格生长在 InP 衬底上的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 材料的影响, 以及对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构能带排列的影响, 获得了一系列的计算结果。讨论了平面双轴应变对有效质量的影响。所用的方法对应用能带工程进行器件设计具有重要的指导意义, 所获得的计算结果为 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 匹配及应变量子阱器件的设计及分析理解实验现象提供了很有价值的参考依据。

0.5%

90Å

品的

与体

多量

具有

围为

数为

(RD

结果

式结

变量

算结

而双

以上

间

五、(AlGa)InP/GaAs 可见光激光器结构材料的 GSMBE 生长及特性研究

(AlGa)InP/GaAs 可见光激光器结构材料由于其重要而广泛的应用前景而深受各国重视。制备和研究量子阱 LD、尤其是研制应变量子阱 LD,是国际热门和前沿研究领域。由于该种结构材料中既含有 As 又含有 P 而且含有 Al,因此生长难度较大。我们在国产 GSMBE 设备上,在国内首次对 InGaP、 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}$ 材料的 GSMBE 生长及掺杂特性进行了研究,获得了质量较好的外延层材料及所需要的掺杂浓度。在此基础上,用 GSMBE 方法试制了双异质结激光器(DH LD)和分别限制压应变单量阱(SCH—CSSQW—LD)激光器结构材料,并做了宽接触芯片,对芯片做了电学和光学测试。结果表明制备的器件达到了超辐射状态。

变 对 能 可。 带 十 里 记

ABSTRACT

Quantum well and superlattice, especially strained Layer quantum well and superlattice materials are novel artificial materials. Fabrication of and study on these materials and their related devices are now a worldwide frontier in the fields of materials science because they play a very important role in both fundamental research and novel device applications.

Gas source molecular beam epitaxy (including V-group hydride source molecular beam epitaxy, GSMBE, and chemical beam epitaxy, CBE) are the newest development in epitaxial growth technology which were born early in 1980's. They combine many important advantages of solid source molecular beam epitaxy (SSMBE) and metalorganic chemical vapor deposition (MOCVD), both of which were first developed in 1968, and advance the epitaxial technology beyond both techniques. Gas source molecular beam epitaxy is suitable for growing semiconductor materials and structures containing P or both As and P elements. Although great attention has been paid to these techniques in many countries, they are in the starting and exploring stage in our country.

InGaAs(P)/InP material system finds important applications in electronic and optoelectronic devices. (AlGa)InP/GaAs visible laser diodes have wide application prospects in military affairs and national economy construction. Development of InGaAs/InP quantum well and superlattice materials, and of (AlGa)InP/GaAs visible laser diodes are two of the "863" high technology subjects of our country.

In this Ph. D thesis, focused on these two high technology subjects, InGaAs/InP quantum well and superlattice materials as well as (AlGa)InP/GaAs visible laser diode structural materials have been prepared by using the first home made GSMBE system, and their structural, electrical and optical properties have been studied by employing the advanced analysis and measure-

ment techniques. The influence of quantum size effect, alloy composition effect and in-plane biaxial strain effect on the energy band structure for $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ coherently grown on InP substrate and on the exciton transition energies in the $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ quantum well have also been studied theoretically and experimentally. The following is mainly included in this dissertation:

I. Growth and investigation of InP/InP , $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ and $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ materials

Using GSMBE technique, material of InP/InP and heterostructural materials of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ and $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ have been grown for the first time in China. The effects of various factors on the quality of the GSMBE materials are studied. For the first time, the influence of growth temperature and V/III ratio on the GSMBE grown $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quality is investigated systematically. The $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ material with high quality which reaches the 1990's international level is obtained. The conclusions achieved have important significance for further growth of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ materials and related devices.

(1) The key problem in the growth of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ material is to control the indium composition precisely so that lattice matching is achieved. Based on the RHEED measured growth rate curve, the relation between In cell temperature variation and lattice mismatch is derived. Guided by this relation, the InGaAs/InP heterostructural materials with lattice mismatch smaller than 10^{-3} are obtained.

(2) The effects of growth temperature on GSMBE grown $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ optical properties are systematically studied. We find that the optimum growth temperature is about 500°C when the growth rate is $1\text{ML}/\text{S}$, the V -group hydride cracking cell temperature is 950°C and the flow rate of arsine (AsH_3) is 10sccm , and that the full width at half maximum (FWHM) of the photoluminescence (PL) spectra is smaller when the growth temperature become higher.

(3) The influences of V/III ratio on the GSMBE grown $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$

optical properties are investigated systematically for the first time. We conclude that the AsH_3 flow rate can be selected between 8 and 12 sccm and the optimum AsH_3 flow rate is about 10 sccm when the growth rate is 1 ML/S, the growth temperature is 500 °C and the hydride source cell cracking temperature is 950 °C.

(4) For a typical $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ sample with $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ thickness of 1 μm , the DCXRD rocking curve of it shows that the vertical lattice mismatch of the epilayer relative to InP substrate is 2.0×10^{-4} and that the FWHM of the rocking curve is 26 arc seconds which is very near to the theoretical limit at this thickness. The Hall measurement indicates that the unintentionally doped electron concentration is $5.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, and the mobility at 77 K is $45600 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{S}$. This mobility value is above those reported in the literature with the same undoped electron concentration.

(5) For a typical $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{y\text{P}_{1-y}}/\text{InP}$ quaternary compound semiconductor sample with $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{y\text{P}_{1-y}}$ thickness of 1 μm , the DCXRD rocking curve shows that the $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{y\text{P}_{1-y}}$ epilayer has a vertical lattice mismatch of 1.3×10^{-3} and that the rocking curve has a FWHM of 129 arc seconds. The 10 K PL spectrum of this sample indicates that the peak wavelength is 12280 Å and the FWHM is 11.0 meV. Using Auger spectra, the P concentrations in four samples are determined. The relation between the P concentration in the solid phase and that in the gas phase agrees well with the results reported in the literature.

1. Growth and study on $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ lattice-matched single quantum well and multiquantum well materials

Based on the detailed analysis of the GSMBE growth process, an unsymmetrical gas switching sequence are put forward. Using this sequence, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quantum well materials which reach the 1990's international level in quality have been successfully obtained.

(1) Because $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ quantum well structural materials contain both As and P elements, one key problem encountered in the GSMBE growth

of these materials is the great difficulty in achieving compositional abrupt interfaces. Based on the detailed analysis of the GSMBE growth process, we point out that the two main factors which are responsible for the degradation of the interface quality are "substitution effect" and "memory effect", the former happens in the period of growth interruption, and the latter in the period of growth duration. The influences of these two effects on the interfacial quality are analysed in detail. Based on this analysis, the unsymmetrical gas switching sequence has been presented which can improve the quantum well interfacial quality.

(2) The low temperature PL measurements show that the fluctuation of the quantum well interface is smaller than one molecular layer ($2.93 \text{ \AA}$). By comparing our PL results with theoretical and W. T. Tsang's CBE results, we find that for well widths larger than $40 \text{ \AA}$, the experimental results of present work is in good agreement with W. T. Tsang's work and the calculated results; for well widths narrower than $40 \text{ \AA}$, the discrepancy between the theoretical and experimental results becomes significant, and the experimental value is smaller than the corresponding calculated one. But our experimental results are better than the experimental values given in the literature. These results confirm the effectiveness of the unsymmetrical gas switching sequence in improving the quantum well interfacial quality.

(3) Combining the GSMBE growth process, the red shift of the exciton transition energies in the narrower quantum wells relative to the theoretical values has been qualitatively explained using compositional step quantum well model.

(4) For the first time in China, the $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ lattice-matched multiquantum well and superlattice materials are grown by GSMBE method. The DCXRD, low and room temperature measurements are carried out for the grown samples. The FWHM of the PL spectra are between 6.9 and 7.7 meV at 10K and 11.8 meV at 300K. The DCXRD rocking curve appears 14 satellite peaks. These results indicate that the samples have a high quality.

III. Growth and investigation of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained-layer quantum well and superlattice materials

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained-layer quantum well and superlattice materials are rarely studied in the literature. The main reason is that to grow $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained-layer quantum well and superlattice material, we need not only to avoid producing dislocations to realize coherent growth, but also to overcome the influence of substitution and memory effects on the quantum well interfaces. Therefore, It is more difficult to grow $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained-layer quantum well and superlattice materials.

Using the first home made CBE system, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained-layer quantum well and superlattice materials with various structures and different indium compositions have been grown by GSMBE technique for the first time in China. The systematic study on the growth, the properties and the effects of the in-plane biaxial strain on the exciton transition energies in the $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained quantum well has been made.

(1.) The characteristics of the lattice-mismatched epitaxy is discussed. The concept of critical layer thickness and its calculation methods for single strained layer, single quantum well and multiquantum well and superlattice are given. For $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ material system, the critical layer thickness has been calculated.

(2) A sample with $+0.5\%$ strain and with different well widths ($10\text{\AA} \sim 110\text{\AA}$) on one wafer is grown. The 10K PL measurement for this sample show that the FWHMs of the PL spectra of the $70\text{\AA}$ and $90\text{\AA}$ well are 4.5meV , indicating that the sample has a high quality. From the results of the PL spectra measured at different temperatures from 10K up to 300K for this sample, we find that the variation of the exciton transition energies with temperature in the quantum wells is the same as that in the $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ bulk material.

(3) A strained-layer multiquantum well sample is grown which has a well width of $54\text{\AA}$, a barrier with of $129\text{\AA}$, a period number of 40 and a compressive strain of 0.4% . From its DCXRD rocking curve, we can observe 21 satellite peaks.

(4) To investigate the effect of in-plane biaxial strain on the exciton transition energy in the quantum wells, we have grown a series of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained quantum wells in a P-i-N configuration with x varying from $x=0.39$ to $x=0.68$. Double crystal x-ray diffractions and their computer simulation are used to determine the structural parameters and indium composition in the well of the samples. The agreement between indium concentration and structural parameters determined from fitting and those estimated from the growth parameters is good, indicating that the growth process can be well controlled. Also, the room temperature PV spectrum, low temperature PL and absorption spectrum are used to determine the exciton transition energies. The transition energies obtained experimentally at low temperature agree well with calculated results. We observe from experiment, for the first time in China, that the distance between the 1H exciton and 1L exciton absorption peaks varies with indium concentration in the $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ strained-layer quantum wells.

IV. Theoretical calculation

The influence of quantum size effect, alloy composition and in-plane biaxial strain on the energy band structure and exciton transition energy in the $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells has been studied systematically and synthetically. The exciton transition energies in the lattice-matched and strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}/\text{InP}$ quantum wells are calculated. The effects of the in-plane biaxial strain on the energy gap of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ coherently grown on InP substrate and on energy band alignment of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ material system has been investigated. A series of calculated results have been obtained. The method used has important significance for applying energy band engineering to design devices. The results obtained provide a valuable reference to designing lattice-matched and strained-layer quantum well devices and to understanding and analysing experimental phenomena related to $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ material.

V. Growth of and study on $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P/GaAs}$ visible Laser diode structural material

$(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P/GaAs}$ lasers with emission in the visible wavelength region have wide and important applications. Fabrication of and study on quantum well LD, especially strained quantum-well LD, are an active and worldwide frontier in the fields of research. But this structural material is difficult to grow because it contains As and P as well as Al elements simultaneously. For the first time in China, the good quality InGaP and (AlGa)InP materials have been grown using the home made GSMBE equipment and their doping properties have been studied. On the basis of this investigation, the double-heterostructure laser diode (DH-LD) and separate-confinement-heterostructure compressive-strained single-quantum-well laser diode (SCH-CSSQW-LD) materials have been grown and the broad-area laser diodes have been fabricated. The measured results of these LDs show that they can reach super-emission state.

§ 1.1 量子阱

1970 年, IBM

Bloch 振荡的材料

固态源 MBE 技术

Esaki 和 Chang^[3]

行为;同年, Ding

1975 年, H. Sakai

出到现在二十多

半导体量子阱和超

步被揭示出来。现

个最重要的方面

导体科学技术中

量子阱和超

(1)量子尺寸

范围之内,因此产

方向)出现了分立

为微带), k_x, k_y 平

调节阱宽,可以改

(2)阶梯(台

阱层平面内运动

阶梯(台阶)状的

(3)输运特性

交迭较大,因此可

效应^[8],甚至出现

(4)载流子运

第一章 绪论

§ 1.1 量子阱和超晶格的特点及应用

1970年,IBM实验室的L. Esaki和R. Tsu为了寻找容易实现负阻效应和Bloch振荡的材料,首次提出了半导体超晶格的概念^[1]。1971年,A. Y. Cho^[2]用固态源MBE技术生长出了世界上第一个GaAs/AlGaAs超晶格材料。1974年,Esaki和Chang^[3]报导了由于电子共振隧穿势垒而引起的纵向微分电导的振荡行为;同年,Dingle等人^[4,5]的光学测量直接证实了量子阱内量子化能级的存在。1975年,H. Sakaki等^[6,7]首次提出了量子线和量子点的概念。从超晶格概念的提出到现在二十多年来,由于超薄异质结构材料外延生长技术的不断发展和完善,半导体量子阱和超晶格材料所具有的崭新的物理性能及重大的器件应用前景逐步被揭示出来。现在,半导体量子阱和超晶格已成为公认的凝聚态物理科学中一个最重要的方面之一。半导体量子阱和超晶格材料的生长、物理及器件研究是半导体科学技术中极其重要的前沿研究领域。

量子阱和超晶格材料具有下列特点:

(1)量子尺寸效应(QSE)。由于量子阱的厚度被控制在电子的德布罗意波长范围之内,因此产生了一维量子限制效应,其结果是 k_z 方向上(垂直于量子阱层方向)出现了分立的能级(对超晶格,由于相邻阱之间的耦合作用,分立能级展宽为微带), k_x, k_y 平面内出现了二维子能带。同时,阱层材料的有效带隙增大,通过调节阱宽,可以改变这一有效带隙。

(2)阶梯(台阶)形态密度。由于一维量子限制效应,阱中的载流子只限于在阱层平面内运动,因此态密度在一定的能量范围内是一常数,而总的态密度具有阶梯(台阶)状的分布。

(3)输运特性中的负阻效应。在超晶格系统中,由于势垒较薄,电子的波函数交迭较大,因此可产生电子的共振隧穿现象,表现在 $I-V$ 特性上就是出现负阻效应^[8],甚至出现Bloch振荡^[9]。

(4)载流子迁移率的增加。通常母体杂质原子与其产生的载流子共存于半导

体中,因此,在载流子的输运过程中,不可避免地要受到杂质原子的散射。但在调制掺杂结构中,只在势垒中掺杂,而阱中不掺杂,因此,母体杂质原子与载流子分布在不同的空间区域,减小了杂质散射,使得载流子的低温迁移率大大提高^[10]。

(5)增强的激子效应和光学非线性响应。对体材料,在低温下才能在高纯样品中观察到自由激子的光致发光,而一般占主要地位的是各种非本征发光。但在量子阱和超晶格中,由于 QSE 效应压缩了激子半径,导致激子束缚能增加^[11],因而对非故意掺杂的材料(杂质浓度 $\sim 10^{15} \text{cm}^{-3}$),其发光过程以本征发光为主^[9]。激子的二维特性还会导致量子阱和超晶格材料的非线性光学特性^[12]。

上述特点,不仅引起了人们对半导体量子阱和超晶格的物理现象的极大兴趣,而且也使半导体光电子器件及微电子器件的研究进入了新的发展阶段。具体表现在以下方面:

(1)根据 QSE,在量子阱或超晶格结构中,带隙是阱宽和势垒高度的函数,通过这两个函数可以人为地改变带隙的宽度。此外,由于人工周期的引入,通过布里渊区的折迭效应,有可能将间接带隙材料的能带极值点折迭到 Γ 点,从而实现由间接带隙材料构成直接带隙材料^[13]。因此,通过 QSE 效应和布里渊区的折迭而实现的能带工程,为半导体器件的设计以及新的光学材料的制备开辟了新的途径。

(2)由于量子阱中受限载流子的态密度呈台阶状分布,因而使得用量子阱结构制成的激光器的性能明显得到改善,如阈值电流密度大大降低,特征温度 T_0 显著提高^[14]等。用 MBE 方法生长的 AlGaAs/GaAs 量子阱激光器,其阈值电流可低于 1mA。

(3)在光通信系统中,做为探测器的雪崩二极管 (APD) 的重要参数之一一是信噪比 (SNR)。改进 SNR 的重要手段是使电子和空穴具有不同的电离率。在量子阱或超晶格中,由于电子与空穴有不同的势垒高度,可使它们的雪崩电离率相差很大,因此,具有量子阱或超晶格结构的 APD,其 SNR 可明显提高^[15]。

(4)在量子阱中,当外加平行于 Z 方向(生长方向)的电场时,势阱两侧的势垒发生倾斜,电子与空穴的基态波函数交迭减小,其结果表现为:随着外场增加,量子阱的发光能量向低能方向移动,发光强度减小;当电场强度达到一定值时,甚至发生激子发光的淬灭^[16],此即量子限制 Stark 效应 (QCSE)。采用 QCSE 实现的量子阱光调制器,不仅具有工艺简单、低电压、速度快的特点,而且工艺与量子阱激光器兼容,从而有利于光集成器件的制造^[17]。

但在调
流子分
高^[10]。
高纯样
。但在
加^[11]，
之光为

2]。

及大兴
。具体

函数，
，通过
、而实
、的折
了新

阱结
变 T_0 。
电流

一是
在量
率相

的势
加，
时，
；实
可量

此外，利用量子阱中自电光效应的光双稳器件(SEED)^[18]，利用异质结构隧道效应的热电子晶体管(RHET)^[19]，以及利用调制掺杂技术的高速 HEMT 都已制成^[20]。可以看出，随着半导体超晶格和量子阱材料研究的不断深入，不仅使半导体物理的研究得到了新的发展，而且为新一代半导体器件的开发研究开辟了新的、广阔的领域。

§ 1.2 应变量子阱和超晶格的概念和特点

早期生长量子阱或超晶格结构所选用的材料通常为晶格匹配的材料体系，如 GaAs/AlGaAs, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{InP}$ 等。这些材料体系有近似相同的晶格常数，容易生长得到无应力和缺陷的晶体及界面，从而获得良好的光学和电学特性。但是，晶格匹配的要求极大地限制了材料体系的选择范围。

Van der Merwe^[21]在 1963 年提出，如选择晶格失配小于 2% 的材料，当外延层足够薄时，失配可以由均匀的弹性应变来调节。Matthews^[22]等人在 1974 年根据力平衡模型提出了应变异质结构生长的临界厚度概念。根据这一理论，1982 年 Osbourn^[23]第一次用 MBE 方法生长出了高质量的 GaAs/GaAsP 应变超晶格结构。Osburn 等人生长应变超晶格的成功，标志着生长超晶格技术的发展进入了新的阶段。到了本世纪八十年代中期，半导体超薄层微结构异质外延材料研究的重点逐渐由晶格匹配材料体系转向了晶格失配材料体系。这不仅给人们带来了更大的材料体系选择的自由，而且应变作为一个新参量，通过组份、层厚控制材料的物理性质，实现了材料能带的剪裁，为发展新型人工改性材料和研制新一代光电器件开拓了一个崭新的领域。

目前，国内外十分重视应变异质结构材料的生长和物理性质的研究，其原因除了应变超晶格材料具有一般晶格匹配材料超晶格的特点以外，还具有以下特殊性质：

- (1) 应变使材料的带隙改变，解除了价带的简并^[24]。
- (2) 应变改变了载流子的有效质量^[25]。
- (3) 应变使异质结构材料的导带及价带不连续量发生改变。
- (4) 独立地改变材料的某些物理参数^[26-29]。
- (5) 应变超晶格材料对位错和点缺陷的传播具有阻碍作用。Tischler^[30]和 Gourley^[31]等人发现，应变超晶格可以改变位错的传播方向，减少(抑制)穿透位错。这一现象表明，应变超晶格可以起到位错或点缺陷的势垒作用因而具有很大

的实用价值。

(6) 利用应变外延生长的自组织效应, 可以制备高质量的低维半导体结构(量子线、量子点)材料, 目前借助此方法生长得到的量子线、量子点激光器表现出优越的性能^[32]。

§ 1.3 应变量子阱和超晶格的应用

将均匀应变引入量子阱和超晶格结构中, 无论对光电子器件的性能还是对微电子器件的性能, 均具有极其诱人的改善作用。

(1) 对激光器性能的改善。

利用平面压缩应变可以使激光器(LD)的性能得到改善是 1986 年由 Adams^[33]和 Yablonoich^[34]最早提出来的。他们指出压缩应变使最高空穴子带在生长平面方向具有较轻的有效质量, 利用这一点, 可使激光器阈值电流减小, Auger 复合和价带间吸收减小, 特征温度 T_0 增大, 内量子效率和微分增益增大, 线宽因子减小。随后压缩应变量子阱激光器飞速发展。

无论压缩还是伸张应变量子阱激光器, 其性能都明显优于非应变结构激光器的性能。实验上发现^[35, 36], 伸张应变量子阱激光器也可以实现比无应变量子阱 LD 更低的阈值电流, 更高的发射功率和更高的调制频率。利用压缩应变, H. Temkin^[37]发现内部损耗只为 $2 \sim 5 \text{ cm}^{-1}$; Thijs^[38]发现内量子效率为 100%。采用 0.8% 压缩应变的 InGaAs/InP 应变量子阱 LD 的阈值电流密度低达 147 A/cm^2 , 1.6% 伸张应变达 92 A/cm^2 , 两种应变量子阱 LD 的最小 I_{th} 都为 0.8 mA ^[39]。InGaAs/GaAs 压应变多量子阱 LD 最小 $J_{th} = 65 \text{ A/cm}^2$ ^[40], 接近理论计算值。InGaAs/GaAs 压应变 MQW 激光器阈值电流达 0.35 mA ^[41], InGaAs/GaAs LD 特征温度 T_0 达到 178 K ^[42]。InGaAs/InGaAsP SL—MQW-LD 最高工作温度为 $130 \sim 140^\circ \text{C}$ ^[39]。InGaAs/InGaAsP SL—LD 输出功率达 325 mW ^[39], InGaAs/GaAs 单面功率为 1.6 W ^[40]。InGaAs/InGaAsP SL—LD 大功率工作寿命已达 2 万小时以上^[43]。到目前为止, InGaAs/GaAs 量子阱激光器已经在大功率, 极低阈值电流^[44], 高速调制^[45]等方面取得突破, 并已进入实用领域(商品化)。

(2) 对光调制器和光开关性能的改善

在双轴张应变下, 可使 Γ 点简并的价带分裂方向正好与 QSE 使生长方向上轻重空穴能级移动的方向相反。因此, 通过选择合适的应变层厚度, 组份以及势垒材料, 可以在应变量子阱中产生轻重空穴能级重合的现象, 结果使应变量子阱

中的吸收增强。这种效应对光调制器和光开关的设计十分有用。Kothiyal^[46]等人在 InGaAs/GaAs 应变多量子阱结构中的实验证实了这一设想。这一效应也可用于其它材料体系,并且可提高光二极管和光调制器的量子效率。

(3)在互补逻辑电路中的应用。

在互补逻辑集成电路中,为了提高器件的工作速度,关键是提高空穴迁移率。由于应变可使价带最上部的子带有较轻的平面有效质量,从而可在互补逻辑电路中得到应用。Osborn 等人^[47]的实验表明,在 InGaAs/GaAs 应变系统中,随着应变的改变,平面空穴有效质量在 $0.13 \sim 0.16m_0$ 之间变化,其中 m_0 为自由电子质量。Henderson 等人^[48]以及 Lee^[49]等人分别制成了 InGaAs/GaAs 和 InGaAs/AlGaAs 多量子阱 P-MODFET,由于该应变体系有较轻的空穴有效质量,因此该器件速度很快。

(4)制作高电子迁移率晶体管 PHEMT。利用 InGaAs/(Al)GaAs、InGaAs/InAlAs 制作的高电子迁移率晶体管在高跨导、低噪声、高速等方面已取得了可喜的成绩^[50]。

§ 1.4 本文研究内容

本文涉及到两个研究课题,即“InGaAs/InP 量子阱结构材料的 GSMBE 生长及特性研究”和“(AlGa)InP/GaAs 可见光激光器结构材料的 GSMBE 生长及特性研究”。这两个课题均属“863”高技术课题。

InGaAs/InP 材料系统既含 As 又含 P, (AlGa)InP/GaAs 材料系统既含 As 又含 P 而且还含有 Al, 这些特点使得这两种材料均难以生长。生长这两种材料的方法有 MOCVD、GSMBE 和 CBE, 其中 GSMBE 和 CBE 是较新的生长方法。我们在国产第一台 CBE 设备上,首次在国内用 GSMBE 生长方法开展了这两个课题的研究工作。“InGaAs/InP 量子阱结构材料的 GSMBE 生长及特性研究”这一课题的研究方案如图 1.4.1 所示。“(AlGa)InP/GaAs 可见光激光器结构材料的 GSMBE 生长及特性研究”的研究路线如图 1.4.2 所示。

全文共为九章,内容安排如下:

第二章,简要地介绍了含 P III—V 族化合物半导体材料的基本性质。

第三章,从理论上系统地研究了量子尺寸效应、应变效应对 In_xGa_{1-x}As 能带结构的影响及 In_xGa_{1-x}As/InP 匹配及应变量子阱中的激子跃迁能量。

第四章,对 GSMBE 技术及国产第一台 CBE 设备进行了简要介绍。

第五章, 给出了 GSMBE 外延方法及 InP、InGaAs/InP 和 InGaAsP/InP 的外延生长结果。

第六章, 提出了非对称切换时序, 生长研究了匹配单量子阱及多量子阱超晶格材料。

第七章, 给出了应变单量子阱材料、应变多量子阱结构材料及应变多量子阱 P-i-N 结构材料的生长及测试结果。

第八章, 给出了 (AlGa)InP 可见光激光器结构材料的研究结果。

第九章, 给出了本文中所得到的主要结论。

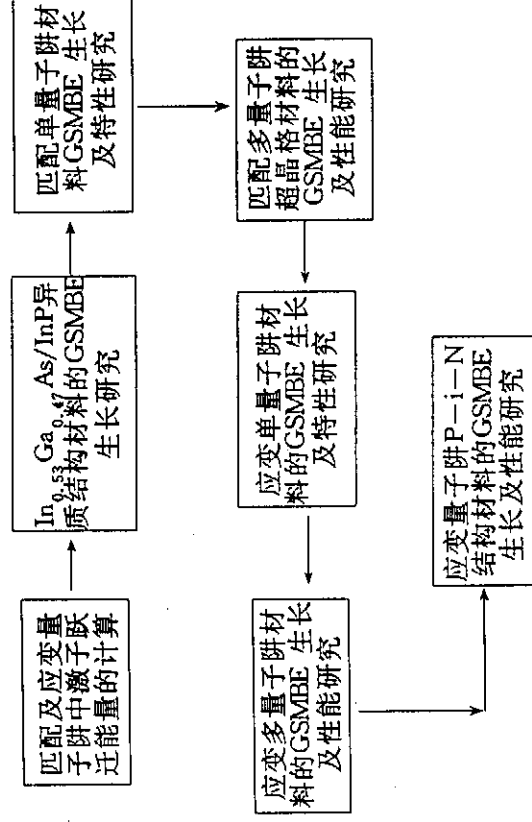


图1.4.1 课题“InGaAs/InP量子阱结构材料的GSMBE生长及特性研究”的研究方案

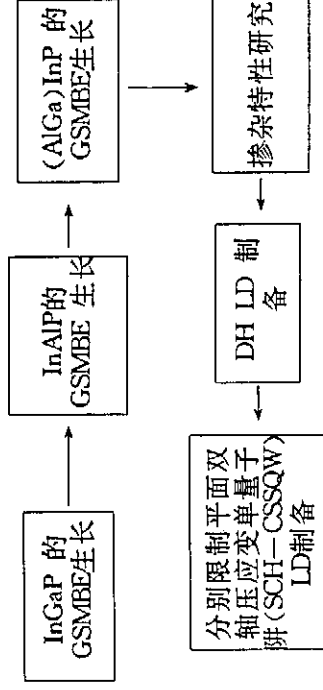


图1.4.2 课题“(AlGa)InP/GaAs可见光激光器结构材料的GSMBE生长及性能研究”的研究路线

参考文献

- [1] L. Esaki and T. Tsu, *IBM J. Res. Develop.*, **14**, 61 (1970).
- [2] A. Y. Cho, *Appl. Phys. Lett.*, **19**, 467 (1971).
- [3] L. Esaki and L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.*, **33**, 495 (1974).
- [4] R. Dingle, W. Wiegmann and C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.*, **33**, 827 (1974).
- [5] R. Dingle, A. C. Gossard and W. Wiegmann, *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 1327 (1975).
- [6] H. Sakaki, K. Wagatsuma, J. Hamasaki and S. Saito, *Thin Solid Films*, **36**, 497 (1976).
- [7] H. Sakaki and T. Sugano, *OYO — BUTSURI* (J. Jpn. Soc. Appl. Phys.), **44**, 1131 (1975).
- [8] L. Esaki, *IBM J. Res. Dev.*, **14**, 61 (1970).
- [9] R. C. Miller, *Phys. Rev.*, **B22**, 863 (1980).
- [10] R. Dingle, *Appl. Phys. Lett.*, **33**, 665 (1978).
- [11] G. H. Dohler, *Phys. Status Solidi* (b), **52**, 79 (1972).
- [12] R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.*, **19**, 246 (1971).
- [13] U. Gnutzmann, *Appl. Phys.*, **3**, 9 (1974).
- [14] W. T. Tsang, *Appl. Phys. Lett.*, **39**, 786 (1981).
- [15] F. Capasso, *IEEE Trans. Electron Devices*, ED—**30**, 381 (1983).
- [16] E. E. Mendez, *Phys. Rev.*, **B26**, 7101 (1982).
- [17] S. Tarucha, *Appl. Phys. Lett.*, **48**, 1 (1986).
- [18] D. A. B. Miller, *Appl. Phys. Lett.*, **48**, 1 (1986).
- [19] N. Yokoyama, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **24**, L853 (1985).
- [20] T. Mimura, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **19**, L225 (1980).
- [21] J. H. Van der Merwe, *Appl. Phys.*, **34**, 117 (1963).
- [22] J. W. Matthews, *J. Crystal Growth*, **27**, 118 (1974).
- [23] G. C. Osbourn, *J. Appl. Phys.*, **53**, 1586 (1982).
- [24] H. Asai, *J. Appl. Phys.*, **54**, 2052 (1983).
- [25] G. L. Bir, *Symmetry and Strained — induced Effects in Semicon.* (John Wiley & Sons, N. Y.), 1974.
- [26] I. J. Frits, *Appl. Phys. Lett.*, **43**, 846 (1983).
- [27] J. Y. Marzin, *Appl. Phys. Lett.*, **43**, 560 (1983).
- [28] W. D. LaiDag, *Appl. Phys. Lett.*, **44**, 653 (1984).

- [29] J. C. Been, *Appl. Phys. Lett.*, 44, 102(1984).
- [30] M. A. Tischler, *Appl. Phys. Lett.*, 46, 294(1985).
- [31] P. L. Gourley, *Appl. Phys. Lett.*, 47, 482(1985).
- [32] G. Wang, *Appl. Phys. Lett.*, 64, 2815(1994).
- [33] A. R. Adams, *Electron Lett.*, 22, 249(1986).
- [34] E. Yablonovich and E. O. Kane, *J. Lightwave Tech.*, 4, 504(1986).
- [35] M. Okamoto, K. Sato. et al, *IEEE J. Quantum Electron.*, 27, 1463(1991).
- [36] P. J. A. Thijs, L. F. Tiemeijer, P. J. Kumdersma, J. J. M. Binsma and T. Van Dongen, *IEEE J. Quantum Electron.*, QE-26, 1323(1990).
- [37] H. Temkin, T. Tanbun - EK, R. A. Logan, J. A. Lewis, and N. K. Duffa, *Appl. Phys. Lett.*, 56, 1222(1990).
- [38] P. J. A. Thijs, and Tvan Dongen, *Electron, Lett.*, 25, 1735(1989).
- [39] P. J. A. Thijs, J. J. M. Binsma, L. F. Tiemeijer, and T. Van Dongen, *IOOC - ECOC* (1991), 31.
- [40] C. A. Wang and K. K. Choi, *IEEE J. Quantum Electron.*, 27, 681(1991).
- [41] T. R. Chen, B. Zhao, Y. H. Zhu, A. Yariv, J. E. Ungar, and S. Oh, *Appl. Phys. Lett.*, 60, 1782(1992).
- [42] R. J. Fu, C. S. Hong, E. Y. Chan, D. J. Booher and L. Figueroa, 12th IEEE Internal Semicon. Laser Conf., D-7.
- [43] S. L. Yellen, R. G. Waters, Y. C. Chen, B. A. Soltz, *Electron Lett.*, 26, 2983(1990).
- [44] A. Larsson, *Appl. Phys. Lett.*, 55, 1168(1989).
- [45] R. L. Williams, *Appl. Phys. Lett.*, 58, 1816(1991).
- [46] G. P. Kothiyal, *Appl. Phys. Lett.*, 51, 1089(1987).
- [47] G. C. Osbourn, *Appl. Phys. Lett.*, 49, 731(1986).
- [48] T. Henderson, *Appl. Phys. Lett.*, 48, 1080(1986).
- [49] G. D. Lee, *IEEE Electron Devices*, QE022, 1677(1986).
- [50] W. J. Schaff, *Semiconductor and Semimetal*, Vol. 33.

第二章 含 PⅢ—V 族化合物半导体材料的性质

目 录

n Don-

Appl.

§ 2.1 引言.....	(10)
§ 2.2 二元Ⅲ—V族化合物半导体材料的晶体结构.....	(10)
§ 2.3 二元Ⅲ—V族化合物半导体材料的能带结构.....	(13)
§ 2.4 合金半导体材料的晶体结构.....	(17)
§ 2.5 合金半导体材料的能带结构.....	(19)
§ 2.6 合金半导体材料的性能参数.....	(22)
§ 2.7 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构材料系统.....	(23)
§ 2.8 $\text{In}_x\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 异质结构材料系统.....	(25)
§ 2.9 本章小结.....	(26)
参考文献.....	(26)

2983

§ 2.1 引言

半导体材料包括 IV 族元素半导体材料(如 Ge, Si 等)及其合金(如 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 等), II - VI 族化合物半导体材料(如 ZnSe, ZnS 等)及其合金(如 $\text{ZnS}_{1-x}\text{Se}_x$ 等), III - V 族化合物半导体材料及其合金, IV - VI 族化合物半导体材料及其合金以及氧化物半导体材料(如 SnO_2 , ZnO 等)等。在 III - V 族化合物半导体材料中,含磷化合物半导体材料系统由于其广泛而重要的应用引起了人们的巨大兴趣和重视,它们已经成为 III - V 族化合物半导体材料中一个重要的家族^[1]。

含磷化合物半导体材料系统主要指生长在 InP 衬底上的 III - V 族化合物半导体材料系统以及生长在其它衬底上的(如 GaAs 等)含 P 化合物半导体材料系统,即衬底中含有 P 或外延层中含有 P 的半导体材料系统统称为含 P 化合物半导体材料系统。含 P 化合物半导体材料系统主要应用在高速、高频微电子器件方面、光电子器件方面以及光子器件方面。例如,生长在 InP 衬底上的三元合金半导体材料 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 、四元合金半导体材料 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 是制备当今高速率、大容量、长距离光纤通信系统用光源及探测器的主要材料^[2-4]; 异质结构材料系统 InGaAs/InAlAs(生长在 InP 衬底上)是制备高速微电子器件如异质结双极晶体管(HBT)及高电子迁移率晶体管(HEMT)的重要材料^[5,6]; InGaAs/InAlAs 异质结构材料系统,由于具有较大的导带不连续性以及在势垒材料 InAlAs 中电子具有较小的有效质量,因而是制备新型器件如共振隧穿晶体管(RTT)的重要材料^[7]; 生长在 GaAs 衬底上的 $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})\text{In}_{1-y}\text{P}/\text{GaAs}$ 材料系统是制备用于取代 He-Ne 激光器的可见光半导体激光器的重要材料系统^[8-10]。

在本论文中,我们将主要涉及到两种含 P 材料系统,它们是 InGaAs(P)/InP 和 AlGaInP/GaAs。与这两种材料系统相关的二元化合物半导体材料有五种,它们分别是 AlP, GaP, GaAs, InP, InAs; 与这两种材料系统相关的三元合金半导体材料也有五种,它们是 InGaAs, InGaP, InAsP, InAlP, AlGaP。二元化合物半导体材料的性质是理解三元、四元等合金半导体材料性质的基础^[11]。因此,为了满足后面几章计算、设计及分析理解有关实验现象的需要,我们在本章集中给出相关二元化合物半导体材料及相关合金半导体材料的一些性质。

§ 2.2 二元 III - V 族化合物半导体材料的晶体结构

绝大多数 III - V 族化合物半导体材料具有闪锌矿型结构。图 2.2.1(a)表示

闪锌矿型结构的晶胞。它是由Ⅲ族原子和V族原子各自组成的面心立方晶格沿空间对角线相对位移四分之一空间对角线长度套构而成。Ⅲ族原子组成的面心立方晶格称为Ⅲ族原子亚晶格，V族原子组成的面心立方晶格称为V族原子亚晶格，在闪锌矿型结构中，每个原子被四个异族原子所包围，例如，如果角顶上和面心上的原子是Ⅲ族原子，则晶胞内部四个原子就是V族原子，反这亦然；如果Ⅲ族原子的坐标是 $(0, 0, 0)$ ， $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ， $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ ， $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ，则V族原子的坐标就是 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ， $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ ， $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ ， $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ ，每个Ⅲ族原子有四个最近的V族原子，十二个次近邻的Ⅲ族原子。由于原子沿体对角线的排列在反演操作下不具有不变性，因而闪锌矿型结构不具有反演对称性。

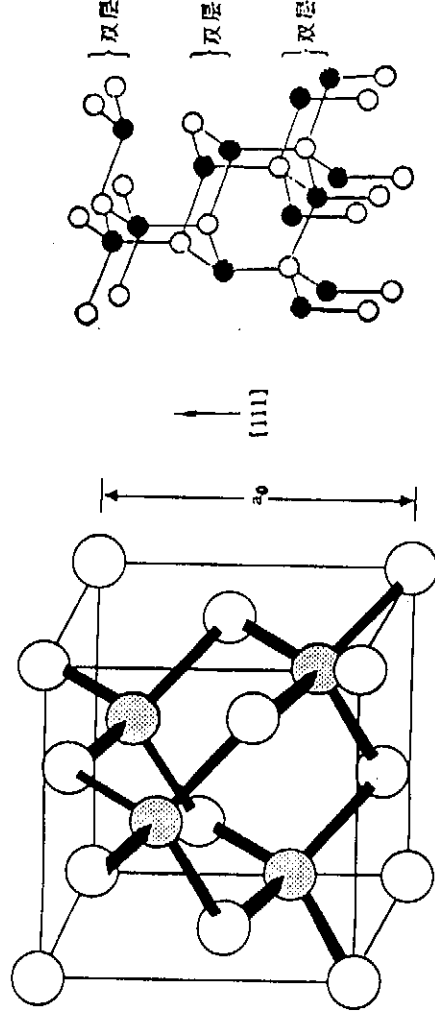


图 2.2.1(a) 闪锌矿型结构的晶胞

图 2.2.1(b) 由Ⅲ族原子层和V族原子层构成的双原子层密排面

闪锌矿型结构的每一晶胞中有四个Ⅲ族原子和四个V族原子，共有8个原子，它们也是依靠共价键结合，但具有一定的离子键性质^[12]。

在垂直于 $[001]$ 方向看闪锌矿型结构的Ⅲ—V族化合物时，可以看到它是由相间排列的Ⅲ族原子面和V族原子面组成。相邻原子面的间距为 $\frac{1}{4}a_0$ ，称之为一个原子单层的厚度，其中 a_0 是晶格常数。相邻Ⅲ族(或相邻V族)原子面的间距为 $\frac{1}{2}a_0$ ，称此厚度为一个分子单层的厚度。单原子层和单分子层是MBE中经常遇到的两个概念。

在垂直于 $[110]$ 方向看闪锌矿型结构的化合物半导体时，可以看到每一晶面

由 III 族原子和 V 族原子相混组成,面内任一原子伸出的四个价键中,有两个在晶面内,有两个在晶面外,伸向晶面外的两个价键所在的平面与该晶面垂直,在 MBE 外延生长过程中,用反射高能电子衍射 (RHEED) 观察表面再构时, [110] 方向是常用的方向。

在垂直于 [111] 方向看闪锌矿型结构的 III - V 族化合物时,可以看到它是由一系列 III 族原子层和 V 族原子层构成的双原子层密排面堆积起来的,如图 2.2.1(b) 所示。双层面内部相互作用强,两个相邻的双层面之间相互作用弱。每一个原子层都是一个 (111) 面,由于 III - V 族化合物具有离子性,因而这种双原子层是一种电偶极层。

当温度发生变化时, III - V 族化合物半导体材料的晶格常数 a_0 也会跟着变化, a_0 随温度的变化用热膨胀系数来表征。一些相关二元化合物半导体材料在室温时的晶格常数、熔点、密度、晶体结构及热膨胀系数于表 2.2.1 中, 其中 ZB (zinc-blende) 表示闪锌矿结构。由于异质结构材料的外延生长总是在高于室温的情况下进行的, 因此, 由于两种异质结构材料一般具有不同的热膨胀系数, 当它们在室温下晶格匹配时, 在生长温度下晶格必然不匹配, 这样会在外延层中引入失配位错。

表 2.2.1 一些二元 III - V 族化合物半导体材料的晶格常数、熔点、热膨胀系数和晶体结构 [13,14]

材料	晶格常数 A	熔点 (°C)	热膨胀系数 ($10^{-10}/^{\circ}\text{C}$)	晶体结构
AlP	5.4635	2823	4.5	ZB
AlAs	5.660	2013	4.9	ZB
GaP	5.4505	1740	4.5	ZB
GaAs	5.65325	1513	6.86	ZB
InP	5.8697	1335	4.75	ZB
InAs	6.0583	1215	4.52	ZB

当半导体材料受到外力作用时, 半导体材料的晶格常数也会发生变化, 也就是说半导体材料在外力作用下会发生形变。外力的大小和方向用应力张量来描述, 应变的大小用应变张量来描述, 应力和应变张量均为二级张量。在弹性限度

内,应力与应变成线性关系,比例系数是一个四级张量,称为弹性顺服常数或弹性硬度常数。弹性顺服常数和弹性硬度常数具有不同的物理概念,它们都用来描述晶体的弹性性质。弹性顺服常数与弹性硬度常数之间不独立,知道了其中的一个,便可以求出另外一个。我们用[S]表示弹性顺服常数,用[C]表示弹性硬度常数。在后面讨论应变对半导体材料性能的影响时,要用到这两个常数。

对具有立方晶体结构的半导体材料,由于立方对称性,弹性顺服常数[S]具有三个独立的分量,它们是 S_{11} , S_{12} 和 S_{44} ; 弹性硬度常数[C]也有三个独立的分量 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 。[S]的分量与[C]的分量之间的关系为^[15]:

$$C_{11} = \frac{S_{11} + S_{12}}{S} \quad (2-2-1a)$$

$$C_{12} = -\frac{S_{12}}{S} \quad (2-2-1b)$$

$$C_{44} = \frac{1}{S_{44}} \quad (2-2-1c)$$

其中

$$S = (S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12}) \quad (2-2-1d)$$

泊松比 ν 与弹性顺服常数之间的关系为^[16]

$$\nu = -\frac{S_{12}}{S_{11}} \quad (2-2-2)$$

相关二元化合物半导体材料的弹性顺服常数汇总在表 2.2.2 中。

表 2.2.2 一些二元化合物半导体材料的弹性顺服常数^[13,16]

材料	AlP	AlAs	GaP	GaAs	InP	InAs
S_{11}	1.090	1.070	0.973	1.176	1.650	1.945
S_{12}	-0.350	-0.320	-0.298	-0.365	-0.594	-0.685
S_{44}	1.630	1.840	1.419	1.684	2.170	2.525

[注]此表中 S_{ij} 的单位为 $10^{-12} \text{cm}^2 \text{dyne}^{-1}$ 。

§ 2.3 二元 III - V 族化合物半导体材料的能带结构

III - V 族化合物半导体材料的能带结构有一些共同特征。因为闪锌矿型结构和金钢石型结构类似,因此,第一布里渊区也是截角八面体的形式,如图

2.3.1 所示。这些化合物基本上都具有相似的价带结构,同硅、锗一样,其价带在布里渊区中心是简并的,具有一个重空穴带和轻空穴带,还有一个自旋——轨道耦合而分裂出来的第三个能带,即自旋——轨道分裂带。但是,价带的极大值并不是恰好在布里渊区的中心,而是稍许有些偏离。各种化合物导带结构有所不同,它们在 $[100]$ 、 $[111]$ 方向和布里渊区中心都有导带极小值,但是,最低的极小值在布里渊区中所处的位置不完全相同,在平均原子序数高的化合物中,最低的极小值是在布里渊区的中心;而在平均原子序数较低的化合物中,最低的极小值是在 $[100]$ 或 $[111]$ 方向。

图 2.3.2 所示是计算得到的 InP 的能带结构^[17]。由图可见,导带极小值和价带极大值均位于 $\vec{k}=0$ 处,即位于布里渊区中心 Γ 点,说明 InP 是直接带隙材料。更高的导带极小值位于 $\langle 100 \rangle$ (Δ) 和 $\langle 111 \rangle$ (Δ) 方向。L 点和 X 点的极小值分别位于 Γ_1 极小值之上 0.40eV 和 0.7eV^[17]处。价带极大值由类 P 轨道 P_x, P_y, P_z 导出,它们在闪锌矿晶格的四面体点群的作用下保持不变性。价带的表象是 Γ_{15} 表象。把自旋考虑在内,价带顶是六重简并的。由于自旋——轨道相互作用,这六个简并态分裂成 $J=3/2$ 的四重态和 $J=1/2$ 的二重态, $J=1/2$ 的能带是最低能带。与 $J=3/2$ 相应的两个带分别称为重空穴和轻空穴带,重空穴带相应的磁量子数为 $m_j = \pm 3/2$; 轻空穴带相应磁量子数为 $m_j = \pm 1/2$ 。 $J=1/2$ 的能带称为自旋——轨道分裂带,相应的磁量子数为 $M_j = \pm 1/2$ 。由于自旋,重空穴带、轻空

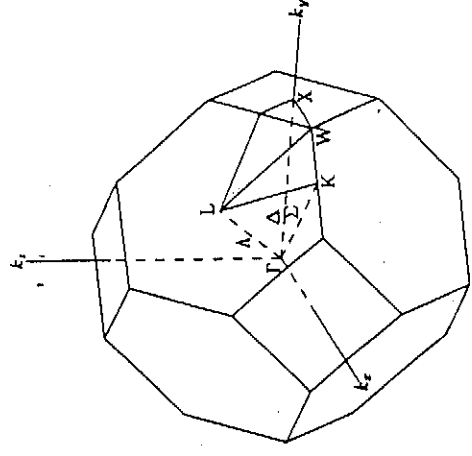


图 2.3.1 闪锌矿型结构的第一布里渊区

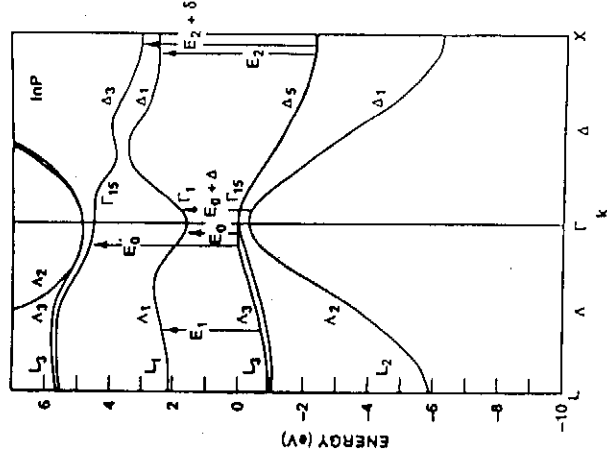


图 2.3.2 InP 的能带结构

穴带以及自旋——轨道分裂带均是二重简并的。

表 2.3.1 给出了相关二元 III—V 族化合物半导体材料的禁带宽度,带隙类型及自旋——轨道裂距。

表 2.3.1 相关二元 III—V 族化合物半导体材料的禁带宽度、带隙类型及自旋——轨道裂距

材料	OK 禁带 宽度 ^[13,14] (eV)	室温禁带 宽度 ^[16] (eV)	自旋轨道 裂距 Δ ^[12] (eV)	带隙类型 ^[13,14]
AlP	2.52	2.45		I
AlAs	2.239	2.153		I
GaP	2.338	2.272	0.127	I
GaAs	1.519	1.4241	0.34	D
InP	1.421	1.344	0.11	D
InAs	0.420	0.354	0.38	D

[注]D:direct;I:inirect

各种化合物的导带电子有效质量不同,平均原子序数较高的化合物中,有效质量较小,然而,各种化合物的重空穴有效质量却相差很少。原子序数较高的化合物,禁带宽度较窄。在禁带宽度最窄的 III—V 族化合物中,由于价带和导带的相互作用使得导带底不呈抛物线形状。表 2.3.2 中给出了相关二元化合物半导体材料的有效质量。

表 2.3.2 相关二元化合物半导体材料的有效质量^[13,14]

材料	电子有效质量 m_e	重空穴有效质量 m_{hh}	轻空穴有效质量 m_{lh}
AlP		0.63	0.20
AlAs	0.79	0.76	0.15
GaP	1.86	0.54	0.16
GaAs	0.067	0.49	0.08
InP	0.075	0.56	0.12
InAs	0.024	0.37	0.025

[注] 有效质量的单位为自由电子质量 m_0 。

半导体材料的禁带宽度随温度的变化而变化。在室温以下,半导体材料的禁带宽度随温度变化的规律由下式表示^[19]:

Eg
其中 Eg
料的 Eg
以得到
(T)随
给出了
度变化

能带
并态
消除
列于
数 a

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{(T + \beta)} \quad (2-3-1)$$

其中 $E_g(0)$ 是 0K 时的禁带宽度, α, β 是常数。表 2.3.3 中列出了不同半导体材料的 $E_g(0)$ [13,14]、 α 及 β [20]。从 (2-3-1) 式, 利用表 2.3.3 中给出的参数, 我们可以得到温度低于室温时的禁带宽度。当温度接近或超过室温时, 禁带宽度 $E_g(T)$ 随温度而非线性变化, 带隙的温度系数 [13,14] 亦列于表 2.3.3 中, 另外, 表中也给出了与 InP 衬底相匹配的 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ [21] 及 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ [22] 的带隙随温度变化的线性温度系数。

表 2.3.3 禁带宽度随温度而变化的温度系数及 0K 时的带隙

材料	$E_g(0)$ (eV)	α ($\times 10^{-4} \text{eVK}^{-1}$)	β	$\frac{dE_g}{dT}$ ($\times 10^{-4} \text{eVK}^{-1}$)
AlP	2.52	3.18	588	
AlAs	2.239	6.0	408	-4.0
GaP	2.338	5.771	372	-5.2
GaAs	1.519	5.405	204	-3.9
InP	1.421	3.63	162	-2.9
InAs	0.420	2.50	75	-3.5
$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	0.822	4.5	327	-3.48
$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$				-4.0

在外部应力的作用下, 半导体的能带结构也会发生明显的变化。液压力使能带整体移动, 只改变半导体的禁带宽度; 而单轴应力使晶体的对称性降低, 简并态发生分裂。对具有立方对称性的半导体材料, 轻、重空穴带在价带顶的简并消除 [23]。半导体的能带在外加应力下的变化由形变势常数 a, b, d 来描述, 其值列于表 2.3.4 中 [13,14]。在液压 P 的作用下, 直接带隙随液压的变化由形变势常数 a 来描述:

$$a = -\frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \frac{dE_g}{dP} \quad (2-3-2)$$

在[100]方向单轴应力作用下,轻重空穴价带的分裂由形变势常数 b 来描述;在[111]方向单轴应力的作用下,轻重空穴带的分裂由形变势常数 d 来描述。轻重空穴带裂距 δE_v 与 b, d 的关系如下:

$$\delta E_v = b(S_{11} - S_{12})\sigma \quad (2-3-3)$$

$$\delta E_v = \left(\frac{d}{2\sqrt{3}}\right)S_{44}\sigma \quad (2-3-4)$$

其中 σ 是外加单轴应力。有关应变对半导体材料能带结构的影响,在第三章中还要作详细的讨论。

表 2.3.4 半导体材料的形变势常数

材料	a(eV)(直接带隙)	b(eV)	d(eV)
AlP			
AlAs			
GaP	-9.6	1.65	-4.5
GaAs	-9.77	-1.70	-4.55
InP	-6.35	-2.0	-5.0
InAs	-6.0	-1.8	-3.6

§ 2.4 合金半导体材料的晶体结构

常见的合金半导体材料有三元合金半导体材料和四元合金半导体材料。三元合金半导体材料有两种类型,一种是ⅢⅤ型(如 InGaAs),另一种是ⅢⅤⅤ型(如 InAsP)。四元合金半导体材料具有三种类型,它们分别是ⅢⅢⅤ型(如 AlGaInP)型,和ⅢⅤⅤ(如 InGaAsP)型和ⅢⅤⅤⅤ型。在后续章节中,我们将讨论三元合金半导体材料 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 、四元合金半导体材料 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ 及 AlGaInP 的 GSMBE 生长及其特性。

合金半导体材料的晶体结构可在二元化合物半导体材料晶体结构的基础上进行讨论,下面我们以 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 为例。 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 是三元合金半导体材料,我们把它看成是由 InAs 和 GaAs 二种二元化合物半导体材料按一定的比例组成。由于 InAs 和 GaAs 象 InP 一样,都具有闪锌矿结构,因而 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 也具

3-2)

b 来描述。

3-3)

3-4)

章中还

有闪锌矿型结构。但是, InGaAs 的晶体结构与 InAs、GaAs 的晶体结构并不完全一样。InAs 的 III 族原子亚晶格上全是 In 原子, V 族原子亚晶格上全是 As 原子; GaAs 的 III 族原子亚晶格上全是 Ga 原子, V 族原子亚晶格上全是 As 原子。而在 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的 III 族原子亚晶格上不是一种原子,而是两种原子。由于这种结构上的差别,使得 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的性质既不同于 InAs 也不同于 GaAs。一般而言, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的性质介于 InAs 和 GaAs 之间。

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的 III 族原子亚晶格上有两种原子 In 和 Ga,那么 In 和 Ga 在 III 族原子亚晶格上是如何进行排列的呢? 根据生成 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的条件不同,它们在 III 族原子亚晶格上的排列有三种情况,这三种情况分别是合金团型,无序型和有序型,如图 2.4.1 所示,其中 A 表示 In 原子, B 表示 Ga 原子。出现合金团,说明合金材料已经不均匀;发现 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}$ 中的有序结构会使 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}$ 的禁带宽度变小^[24]。我们用 GSMBE 生长 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 材料,希望其结构具有图 2.4.1 (b)所示的无序结构。

由于合金半导体材料的能带结构与原子在亚晶格上排列的无序化程度密切相关,因此,合金半导体材料中原子在亚晶格上排列的无序化极其重要。在制作微电子器件和光电子器件时,要求绝大多数合金半导体材料具有图 2.4.1 (b)所示的无序结构。合金晶体结构对图 2.4.1 (b)所示的无序型的偏离会使器件的性能劣化。

一般而言,三元合金半导体材料可以看成由相关的二元化合物半导体材料按一定比例组成,同样,四元合金半导体材料可以看成由相关的二元化合物半导体材料或相关的三元合金半导体材料按一定的比例组成。如果组成合金半导体材料的相关二元化合物半导体材料具有相同的晶体结构,则一般而言,所组成的合金半导体材料也具有相同的晶体结构。合金半导

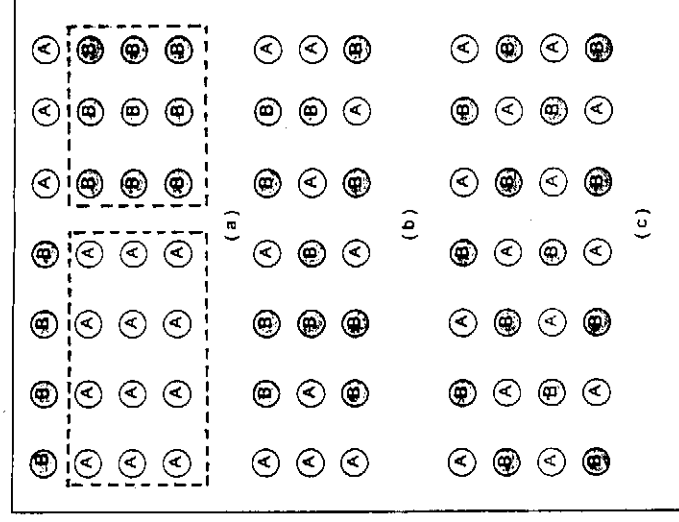


图 2.4.1 合金半导体材料的三种晶体结构

体材料与二元化合物半导体材料在结构上的不同点在于:二元化合物半导体材料在Ⅲ族亚晶格上只有一种原子,在Ⅴ族亚晶格上也只有一种原子;而合金半导体材料在Ⅲ族亚晶格上和Ⅴ族亚晶格上排列的原子多于一种,或严格来说,至少在一个亚晶格上排列的原子多于一种。这种结构上的差别是导致合金半导体材料与组成它的二元化合物半导体材料具有不同性质的根本原因。

合金半导体材料的晶格常数可用 Vegard 定律求出。对三元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C$, 其晶格常数为

$$a = xa_A + (1-x)a_B \quad (2-4-1)$$

其中 a_A 、 a_B 分别为二元化合物半导体材料 AC 和 BC 的晶格常数, x 为合金组份。一些三元合金半导体材料的晶格常数如图 2.4.2 所示^[25]。Vegard 定律表明,三元合金半导体材料的晶格常数可由组成三元合金半导体材料的两种二元化合物半导体材料的晶格常数通过线性内插得到,合金半导体材料的晶格常数位于两个二元化合物半导体材料的晶格常数之间。通过改变合金组份 x , 就可以改变合金半导体材料的晶格常数,以满足我们对晶格常数的需要。

§ 2.5 合金半导体材料的能带结构

尽管在多数应用场合,我们可以用一级近似简单地求出合金半导体材料的能带结构,但是合金半导体材料能带结构的准确计算是极其复杂的,这是由合金半导体材料的晶体结构所决定的。正如我们在前面讨论的那样,合金半导体材料虽然是晶体材料,但是合金原子在亚晶格点上的排列

是随机的(短周期超晶格或有序合金例外)。由于不同种类合金原子的差异,使得晶体势不再具有严格的周期性。这正是合金半导体材料能带结构计算变得极其复杂的原因。由于晶体势具有非周期性,我们就不能再用 Bloch 定理来描述电子的波函数。一般而言,合

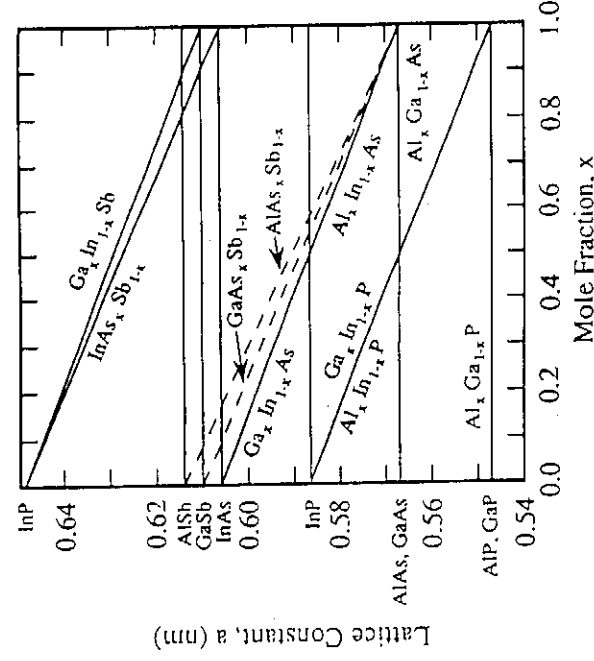


图 2.4.2 一些三元合金半导体材料的晶格常数

导体材料
金半导
说,至少
导体材料
体材料
4-1)
为合金
定律表
种二元
各常数
就可

金半导体材料的电子态不再具有简单的传播波的形式,而具有几率与位置相关的极其复杂的形式。由于无序是合金材料的本征特性,因此,即使在合金原子随机分布的合金材料中,合金原子 A 富余的区域也有一定的几率存在(图 2.4.1)。该富 A 区域可能捕获电子,即形成局域态电子波函数。在很低的温度下,除非通过隧道效应,否则处于局域态的电子不能传导。

通常用一种简单的近似方法来研究合金半导体材料的能带结构,这种方法称为有效晶体势方法^[26,27],如图 2.5.1 所示。该图给出了在实空间中原子势分布的示意图。电子在真实势场中所感受到的势场的随机起伏是显而易见的,然而,在有效晶体近似方法中,用一个平均周期势场来代替随机分布的非周期势场,正如图 2.5.1 所示,

$$U_{av}(\vec{r}) = xU_A(\vec{r}) + (1-x)U_B(\vec{r}) \quad (2-5-1)$$

利用束缚方

法和有效晶体近似,我们可以得到

$$E_g = xE_g^A + (1-x)E_g^B \quad (2-5-2)$$

其中 E_g 是合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C$ 的禁带宽度, E_g^A 是二元化合物半导

材料 AC 的禁带宽度, E_g^B 是二元化合物半导体材料 BC 的禁带宽度。

实验上发现,很多合金半导体材料的带隙随合金组份按非线性规律变化。对 $A_xB_{1-x}C$ 型三元合金半导体材料,带隙可以表示成^[28]

$$E_g(x) = a + bx + cx^2 \quad (2-5-3)$$

其中 c 称为弯曲因子,它来源于合金无序所引起的晶体势的非周期性^[29,30]。常数 a 和 b 由二元化合物半导体材料 AC 和 BC 的禁带宽度决定。

在图 2.5.2 中给出了几种合金半导体材料的带隙随晶格常数的变化曲线,实线表示直接带隙范围,虚线表示间接带隙范围。表 2.5.1 给出了室温下一些合金半导体材料的禁带宽度随组份的变化关系^[25]。

一般而言,如果 AC、BC 均为直接带隙材料,则 $A_xB_{1-x}C$ 在组份 x 的整个变

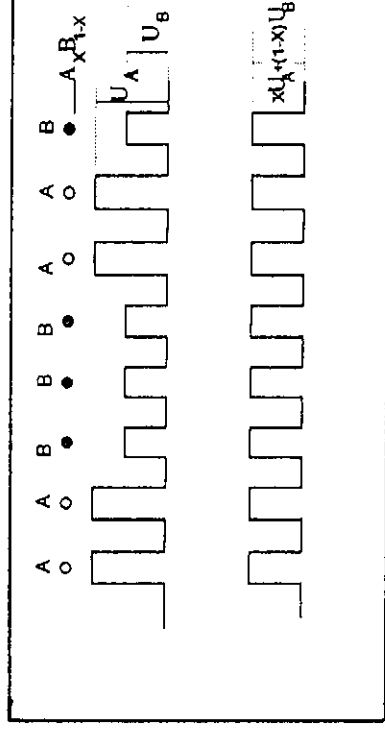


图 2.5.1 有效晶体近似方法

由式

格常数和
Eg和a₀
料只有一
份x和y
度可独立
元合金
的自由
体材料
SSMBE
元素的

§ 2.6

有效质
导体材
参数
公式
材料

2.6.1

数为

的线

其中

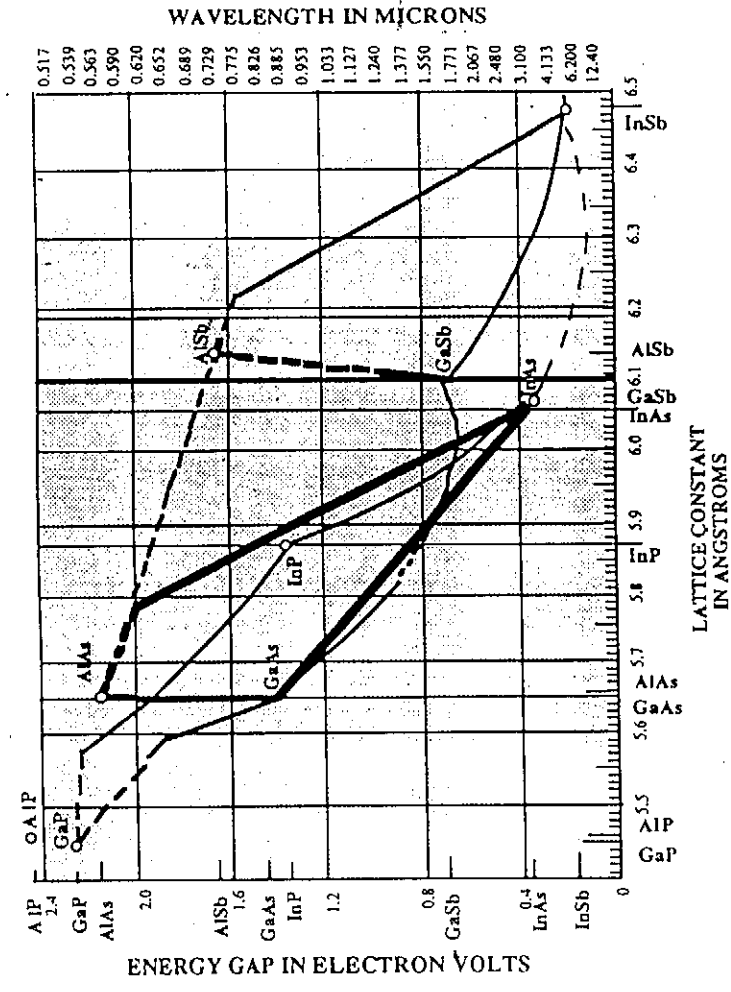


图 2.5.2 几种合金半导体材料的禁带宽度与晶格常数的关系

化范围内($0 \leq x \leq 1$)也为直接带隙材料;如果 AC、BC 中有一个是间接带隙材料,则 $A_xB_{1-x}C$ 可为直接带隙材料,也可为间接带隙材料,究竟是直接带隙材料还是间接带隙材料,与 x 的取值有关;如果 AC、BC 均为间接带隙材料,则一般而言, $A_xB_{1-x}C$ 也为间接带隙材料。

表 2.5.1 室温下一些合金半导体材料的禁带宽度随组份的变化^[25]

材料	直接带隙 $E_g(eV)$
$Al_xIn_{1-x}P$	$1.351 + 2.23x$
$Al_xGa_{1-x}As$	$1.424 + 1.247x$ $1.424 + 1.455x$
$Al_xIn_{1-x}As$	$0.360 + 2.012x + 0.698x^2$
$Ga_xIn_{1-x}P$	$1.351 + 0.643x + 0.786x^2$
$Ga_xIn_{1-x}As$	$0.36 + 1.064x$
GaP_xAs_{1-x}	$1.424 + 1.150x + 0.176x^2$
InP_xAs_{1-x}	$0.360 + 0.891x + 0.101x^2$

由式(2-4-1)和式(2-5-3)可知,对三元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C$,其晶格常数和禁带宽度由 x 唯一地确定,给定了合金组份 x ,就同时给定了 E_g 和 a , E_g 和 a 不能独立变化,这是三元合金半导体材料的缺点。与三元合金半导体材料只有一个独立的合金组份 x 不同,四元合金半导体材料有两个独立的合金组份 x 和 y (如 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$),因而四元合金半导体材料的晶格常数和禁带宽度可独立变化,这是四元合金半导体材料的优点。可见,从器件设计的角度看,三元合金半导体材料的自由度大于二元化合物半导体材料,四元合金半导体材料的自由度大于三元合金半导体材料。但从材料生长的角度来看,二元化合物半导体材料最好生长,三元合金半导体材料次之,四元化合物半导体最难生长。对 SSMBE 和 GSMBE 生长,精确控制合金材料中 III 族元素的组份比精确控制 V 族元素的组份要容易得多。

§ 2.6 合金半导体材料的性能参数

一般而言,如果我们不知道合金半导体材料的某种性能参数(如晶格常数、有效质量、形变势常数等),我们可以根据组成合金半导体材料的二元化合物半导体材料的此种性能参数,用线性内插的办法求出合金半导体材料的该种性能参数^[11]。前面我们给出了求合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C$ 的晶格常数和禁带宽度的公式,在本节中,我们将给出求三元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C$ 和四元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 任意性能参数的公式。

2.6.1. 三元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C$

可以看作由二元化合物半导体材料 AC 和 BC 组成。如果 AC 的某种性能参数为 P_{AC} , BC 的相应的性能参数为 P_{BC} ,则 A_xB_{1-x} 相应的性能参数由下式给出:

$$\begin{aligned} P(A_xB_{1-x}C) &= xP_{AC} + (1-x)P_{BC} \\ &= a + bx \end{aligned} \quad (2-6-1)$$

其中 $a = P_{BC}$, $b = P_{AC} - P_{BC}$

一般而言,只有合金半导体材料的晶格常数严格服从(2-6-1)式所表示的线性内插规律,其它性能参数是 x 的二次函数,在这种情况下,我们有

$$P(A_xB_{1-x}C) = a + bx + cx^2 \quad (2-6-2)$$

其中 c 称为非线性弯曲因子。如果不知道 c , (2-6-1) 式是一个很好的近似。

2.6.2 四元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$

四元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 可以看成是由 AC 、 AD 、 BC 、 BD 四种二元化合物半导体材料组成,因此,合金半导体材料的性能参数 $P(A_xB_{1-x}C_yD_{1-y})$ 可以由这四种二元化合物半导体材料相应的性能参数经线性内插得到:

$$P(A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}) = xyP_{AC} + x(1-y)P_{AD} + (1-x)yP_{BC} + (1-x)(1-y)P_{BD} \quad (2-6-3)$$

其中 P_{AC} 、 P_{AD} 、 P_{BC} 、 P_{BD} 分别是组成 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 的四个二元化合物半导体材料 AC 、 AD 、 BC 、 BD 相应的性能参数。

另一方面,我们也可以把 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 看成由四个三元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C$ 、 $A_xB_{1-x}D$ 、 AC_yD_{1-y} 、 BC_yD_{1-y} 组成,如果知道这四种三元合金半导体材料的性能参数 P_{ABC} 、 P_{ABD} 、 P_{ACD} 和 P_{BCD} ,我们可以求出四元合金材料 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 相应的性能参数:

$$P(A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}) = \frac{x(1-x)(yP_{ABC} + (1-y)P_{ABD}) + y(1-y)(xP_{ACD} + (1-x)P_{BCD})}{x(1-x) + y(1-y)} \quad (2-6-4)$$

§ 2.7 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 异质结构材料系统

2.7.1 晶格常数

由表 2.2.1 和式 (2-4-1) 所表示的 *Vegard* 定律可得 $In_xGa_{1-x}As$ 体材料在自由状态下(即不发生形变)的晶格常数为:

$$a(x) = 6.0583x + 5.65325(1-x) = 0.40505x + 5.65325 \quad (2-7-1)$$

$In_xGa_{1-x}As/InP$ 系统的晶格失配度为:

$$\frac{\Delta a(x)}{a_0} = \frac{a(x) - a_0}{a_0} = (6.902x - 3.671) \times 10^{-2} \quad (2-7-2)$$

其中 $a_0 = 5.8687 \text{ \AA}$, 为表 2.2.1 给出的 InP 的晶格常数。由 (2-7-2) 式可知:

- ① 当 $x = 0.532$ 时, $\frac{\Delta a(x)}{a_0} = 0$, 即 $In_xGa_{1-x}As$ 与 InP 晶格匹配;
- ② 当 $x > 0.532$ 时, $\frac{\Delta a(x)}{a_0} > 0$, 即 $In_xGa_{1-x}As$ 的晶格常数大于 InP 的晶格常数;
- ③ 当 $x < 0.532$ 时, $\frac{\Delta a(x)}{a_0} < 0$ 此时 $In_xGa_{1-x}As$ 的晶格常数小于 InP 的晶格常数;

王晓亮: InGaAs/InP 应变量子阱及 (AlGa)InP 可见光激光器结构材料的 GSMBE 生长及特性研究

- ④ 当 $x = 1$ 时, 失配度为 3.23%, 即 InAs 与 InP 的晶格失配为 3.23%;
- ⑤ 当 $x = 0$ 时, 失配度为 -3.67%, 即 GaAs 与 InP 的晶格失配为 -3.67%;

⑥ 晶格失配度随 x 的变化 $d(\frac{\Delta a(x)}{a_0}) = 6.902 dx \times 10^{-2}$ 可见, 当 x 变化 0.01 时, 晶格失配度变化 6.9×10^{-4} ; 当 x 变化 0.1 时, 晶格失配度变化 6.9×10^{-3} 。

2.7.2 $In_2Ga_{1-x}As$ 的禁带宽度

图 2.7.1 是计算得到的 $In_{1-y}Ga_yAs$ (其中 $x = 1 - y$) 的与 Γ 谷、X 谷、L 谷相对应的能隙随组份的变化曲线^[18]。另外, 图中也给出了 Γ 谷电子有效质量随 Ga 组份 y 的变化。

当温度为 2K 时, 文献 [31] 给出:

$$E_g(2K) = 1.5192 - 1.5837x + 0.475x^2 \quad (2-7-3)$$

弯曲因子 $c = 0.475$ 。当 $x = 0.532$ 时, 即当 $In_2Ga_{1-x}As$ 与 InP 晶格匹配时, 由 (2-7-3) 得到 $E_g(2K) = 0.811eV$ 。文献 [32, 33] 给出 $E_g(0) = 0.803eV$, 把此值和 InAs,

GaAs 在 0K 时的禁带宽度代入式 (2-5-3) 中, 可得弯曲因子 c 为 0.523eV。77K 时, $In_2Ga_{1-x}As$ 的禁带宽度为^[34]:

$$E_g(77K) = 1.508 - 1.47x + 0.37x^2 \quad (2-7-4)$$

室温 (300K) 时, $In_2Ga_{1-x}As$ 的禁带宽度为^[35]:

$$E_g(300K) = 1.43 - 1.53x + 0.45x^2 \quad (2-7-5)$$

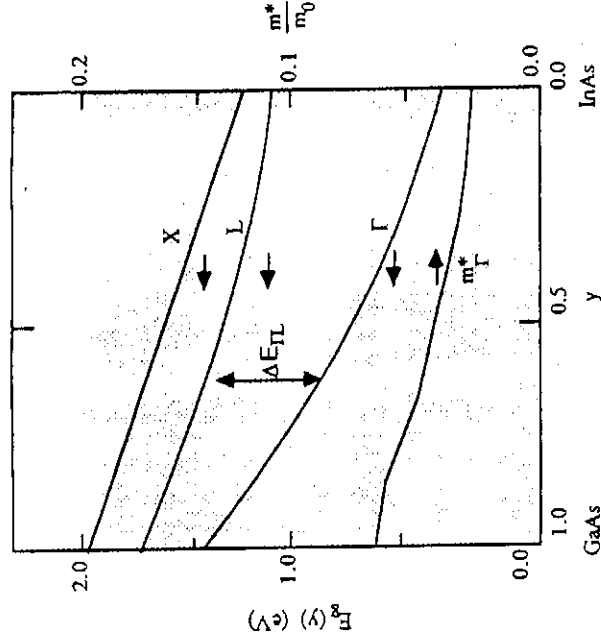


图 2.7.1 $In_{1-y}Ga_yAs$ 的禁带宽度及 Γ 谷电子有效质量随 Ga 组份 y 的变化

晶格

的晶

§ 2.8 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}/InP$ 异质结构材料系统

2.8.1 晶格常数

根据四元合金半导体材料 $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ 的 Vegard 定律,即根据式(2-6-3),可以求得与组份 (x,y) 相应的晶格常数为:

$$a(x,y) = 0.1896y - 0.4175x + 0.0124xy + 5.8687 \quad (2-8-1)$$

如果 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 生长在 InP 衬底上, $a(x,y)$ 还可以写成:

$$a(x,y) = a_{InP} \left[1 + \left(\frac{\Delta a}{a} \right)_0 \right] \quad (2-8-2)$$

其中 $\left(\frac{\Delta a}{a} \right)_0$ 是 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 在自由(驰豫)状态下的晶格失配度,在共格生长条件下,它可由双晶 X 射线衍射测得的相对于 InP 衬底的垂直失配度 $\left(\frac{\Delta a}{a} \right)_1$ 求出^[36]。

$In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 与 InP 衬底的晶格常数差为:

$$a(x,y) - a_{InP} = \Delta a(x,y) = 0.1896y - 0.4175x + 0.0124xy \quad (2-8-3)$$

由(2-8-3)可知:

$$\textcircled{1} \text{ 当 } x < \frac{0.1896y}{0.4175 - 0.0124y} \text{ 时, } InGaAsP \text{ 的晶格常数大于 } InP \text{ 衬底的晶格}$$

常数,晶格处于正失配;

$$\textcircled{2} \text{ 当 } x = \frac{0.1896y}{0.4175 - 0.0124y} \text{ 时, } InGaAsP \text{ 与 } InP \text{ 晶格匹配。}$$

由于与 InP 衬底匹配的 $InGaAsP$ 材料可以看成 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 与 InP 的混晶,因此,晶格匹配条件也可以近似地表示成:

$$x \approx 0.47y, \quad (0 < y < 1.0) \quad (2-8-4)$$

$$\textcircled{3} \text{ 当 } x > \frac{0.1896y}{0.4175 - 0.0124y} \text{ 时, } InGaAsP \text{ 的晶格常数小于 } InP \text{ 衬底的晶格}$$

常数,即晶格处于负失配。

2.8.2 禁带宽度

室温时的禁带宽度如下式^[37]:

$$E_g(x,y) = 1.35 + 0.668x - 1.068y + 0.758x^2 + 0.078y^2 - 0.069xy - 0.322x^2y + 0.03xy^2 \quad (2-8-5)$$

当 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 与 InP 衬底匹配时^[38]:

其中 y 为直接带隙数和禁带节 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 了很多 $InGaAsP$ (35eV), 持禁带改变晶应变和

§ 2.9

在

讨论, 系数、弹们讨论材料的元化合 $InGaAs$ 和禁带金属材料能参数数, 这

[

[

$$E_g(y) = 1.35 - 0.775y + 0.149y^2 \quad (2-8-6)$$

其中 y 为 As 组份。在 y 变化的整个范围内, 即 $0 \leq y \leq 1$, $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 都是直接带隙材料。由 (2-8-3) 和 (2-8-5) 式可知 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 的晶格常数和禁带宽度均依赖于两个独立的变量 x 和 y , 这就使得我们能够彼此独立地调节 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 的晶格常数和禁带宽度, 这为器件设计和能带工程设计提供了很多方便。例如, 在 $InGaAsP$ 与 InP 衬底晶格匹配的条件下, 我们可以对 $InGaAsP$ 的禁带宽度 E_g 进行调节 (从 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 的 0.75eV 到 InP 的 1.35eV), 这一优点在制作长波长分别限制制激光器时得到了广泛应用; 另外, 在保持禁带宽度不变的条件下, 可以对 $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ 的晶格常数进行调节, 从而改变晶格失配度和应变大小, 而应变可以改变半导体材料的能带结构, 也就是说应变和禁带宽度也可以独立调节。以上优点是三元合金半导体材料所没有的。

§ 2.9 本章小结

在本章中, 我们对一些二元化合物半导体材料的晶体结构、能带结构进行了讨论, 并给出了一些二元化合物半导体材料的性能参数, 包括晶格常数、热膨胀系数、弹性常数、禁带宽度、禁带宽度的温度系数、形变势常数等。在此基础上, 我们讨论了合金半导体材料的晶体结构和能带结构, 给出了一些三元合金半导体材料的禁带宽度随合金组份变化的公式, 并给出了由组成合金半导体材料的二元化合物半导体材料的性能参数求合金半导体材料的性能参数的方法。最后对 $InGaAs/InP$ 三元合金材料系统和 $InGaAsP/InP$ 四元合金材料系统的晶格常数和禁带宽度进行了讨论。这两种材料系统的晶格可以匹配, 也可以失配。四元合金材料系统的优点是晶格常数和禁带宽度可以独立调节。合金半导体材料的性能参数依赖于合金组份, 通过调节组份, 就可以选择合金半导体材料的性能参数, 这一性质在能带工程中得到了广泛应用。

参考文献

- [1] V. Swaminathan and A. T. Macrander, *Materials Aspects of GaAs and InP Based Structures*, New Jersey, Prentice Hall, 1991.
- [2] H. Temkin, T. Tanbun-Ek, R. A. Logan, J. A. Lewis, and N. K. Dutta, *Appl. Phys. Lett.*, 50, 1773 (1987).

- [3] S. Charbonneacc, G. C. Aers, K. A. McGreer, M. Davies, D. Landheer, Z. — M. Li, A. Delage, M. Dion, B. Takasaki, D. Conn and D. Moss, *Appl. Phys. Lett.*, 63(1), 12—14(1993). [21]
- [4] W. T. Tsang, *J. Cryst. Growth*, 105, 1—29(1990). [23]
- [5] R. N. Nottenburg, Y. K. Chen, M. B. Panish, R. A. Hamm, and D. A. Humphrey, *IEEE Electron Dev. Lett.*, EDL—9(10), 524—526(1988). [24]
- [6] B. Jalali, Y. K. Chen, R. N. Nottenburg, D. Sivco, D. A. Humphrey, and A. Y. Cho, *IEEE Electron Dev. Lett.*, EDL—11(9), 400—402(1990). [25]
- [7] Y. Sugiyama, et al., *Appl. Phys. Lett.*, 52, 314(1988) [26]
- [8] T. Tanaka, H. Yanagisawa and S. Minagawa, *Electron. Lett.*, 30(7), 566—568 (1994). [27]
- [9] H. Hamada, R. Hiroyama, S. Honda, M. Shono, K. Yodoshi, and T. Yamaguchi, *IEEE J. Quantum Electron.*, 29(6), 1844—1850(1993). [28]
- [10] O. Imafuji, T. Takayama, H. Sugiura, M. Yuri, H. Naito, M. Kume, and K. Itoh, *IEEE J. Quantum Electron.*, 29(6), 1889—1894(1993). [29]
- [11] S. Adachi, *J. Appl. Phys.*, 53(12), 8775—8792(1982). [30]
- [12] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, New York: Academic Press, 1973. [31]
- [13] Landolt—Bornstein, “*Numerical Data and Functional Relationships*” in *Science and Technology*, Vol. 17; Semiconductors subvol. a, ed. O. Madelung, M. Schulz, and H. Weiss, New York: Springer, 1982. [3]
- [14] Landolt—Bornstein, “*Numerical Data and Functional Relationships*” in *Science and Technology*, Vol. 17; Semiconductors subvol. d, ed. O. Madelung, M. Schulz, and H. Weiss, New York: Springer, 1984. [3]
- [15] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals*, Oxford: Clarendon Press, 1957. [3]
- [16] W. A. Brantley, *J. Appl. Phys.*, 44, 534(1973). [3]
- [17] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Berlin: Springer—Verlag, 1988. [3]
- [18] Jasprit Singh, *Physics of Semiconductors and Their Heterostructures* (McGraw—Hill, Inc.), 1993. [3]
- [19] Y. P. Varshni, *Physica*, 34, 149(1967). [3]
- [20] H. C. Casey, Jr. and M. B. Panish, *Heterostructure Lasers Part B: Materials and Operating Characteristics*, New York: Academic Press, 1978, P. 9. [3]

- M. Li,
63(1),
- mphey,
Y. Cho,
36—568
aguchi,
K. Itoh,
: Press,
nce and
and H.
nce and
alz, and
- [21] E. Zielinski, H. Schweizer, K. Streubel, H. Eisele, and G. Weimann, *J. Appl. Phys.*, 59, 2196(1986).
- [22] Y. Yamazoe, T. Nishino, and Y. Hamakawa, *IEEE J. Quantum. Electron.*, QE—17, 139(1981).
- [23] G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain Induced Effects in Semiconductors*, New York: John Wiley & Sons, 1974.
- [24] T. Suzuki and A. Gomyo, *J. Cryst. Growth*, 93, 396—405(1988).
- [25] H. C. Casey Jr., et al., *Heterostructure Lasers*, Academic Press, New York, 1978.
- [26] J. Singh, K. K. Bajaj, *Appl. Phys. Lett.*, 44(11), 1075(1984).
- [27] J. Singh, K. K. Bajaj, S. Chaudhuic, *Appl. Phys. Lett.*, 44(8), 805(1984).
- [28] J. A. Van Vechten and T. K. Bergstresser, *Phys. Rev. B*, 1, 3351(1970).
- [29] J. C. Philips and J. A. Van Vechten, *Phys. Rev. Lett.*, 22, 705(1969).
- [30] J. A. Van Vechten, *Phys. Rev.*, 187, 1007(1969).
- [31] K. H. Goetz, D. Bimberg, H. Jurgensen, J. Selders, A. V. Solomonov, G. F. Glinskii, and M. Razhegi, *J. Appl. Phys.*, 54, 4543(1983).
- [32] I. C. Bassignana, C. J. Miner, and N. Puetz, *J. Appl. Phys.*, 65, 4299(1989).
- [33] E. H. Reihlen, D. Birkedal, T. Y. Wang, and G. Stringfellow, *J. Appl. Phys.*, 68, 1750(1990).
- [34] *J. Electron. Mater.*, 8, 663(1979).
- [35] *J. Appl. Phys.*, 53, 8775(1982).
- [36] J. Hornstra and W. J. Bartels, *J. Cryst. Growth*, 44, 513(1978).
- [37] E. Kuphal, *J. Cryst. Growth*, 67, 441(1984).
- [38] T. P. Pearsall, ed., *GaInAsP Alloy Semiconductors*, New York, 1982, P. 295.

第三章 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 匹配及应变量子阱中 激子跃迁能量的理论计算

目录

§ 3.1 引言	(30)
§ 3.2 异质结的能带排列	(31)
§ 3.3 $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 理论及能带的非抛物性	(32)
§ 3.4 量子阱中量子化能级的理论计算	(36)
§ 3.5 匹配量子阱中的激子束缚能	(42)
§ 3.6 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 匹配量子阱中激子跃迁能量的理论计算 ...	(48)
§ 3.7 应力、应变及弹性常数	(50)
§ 3.8 平面双轴应变张量	(53)
§ 3.9 均匀应变对半导体材料能带结构的影响	(54)
§ 3.10 平面双轴应变中的单轴应变分量对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 能带极值的 影响	(60)
§ 3.11 平面双轴应变对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 带隙的影响	(61)
§ 3.12 平面双轴应变对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构能带排列 的影响	(63)
§ 3.13 平面双轴应变对有效质量的影响	(65)
§ 3.14 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 应变量子阱中激子跃迁能量的理论计算	(70)
§ 3.15 本章小结。	(74)
参考文献	(74)

§ 3.1 引言

半导体微电子学的发展是建立在人们从微观上对 Si 材料物理属性的深入研究基础上的,其核心部分就是通过外电场的调制,人工操纵体内载流子的运动。微电子器件的制备主要借助于杂质在结构图形中的引入,从而实现多种特定的电子功能及其集成。对此,人们称之为掺杂工程。随着掺杂技术从合金技术、扩散技术、外延技术到离子注入技术的发展,人们能够更加精确地控制其空间范围和掺杂浓度及其分布状况。这就推动了微电子器件不断更新换代地向前发展。

在光电子技术和微电子技术的发展中,超高速、高频微电子器件、光电子器件以及光子器件同样要利用掺杂技术来实现。但是,从其关键的突破与飞跃角度来看,未来的发展则借助于能带工程的发展和运用。

我们知道,半导体及器件的光电性能依赖于半导体材料的能带结构。现在,我们能够利用先进外延生长技术,如 MOCVD、MBE、GSMBE、CBE 等对半导体材料及器件的能带结构进行设计、剪裁,使能带结构按照我们的需要发生改变,还不仅使我们对半导体材料的选择范围从“天然材料”扩充到“人工改性材料”,增加了器件设计自由度,而且使器件性能发生了革命性的变化。对半导体材料的能带结构进行设计、剪裁,对其进行人为的改变和控制,此即能带工程。能带工程概念的引入和实施极大地改变了半导体技术、材料、器件及半导体物理的面貌,具有历史性的意义。

七十年代初,单异质结和双异结半导体激光器的问世,就已经揭开了能带工程应用的序幕。通过两种不同带隙材料(如 GaAs,AlGaAs)的匹配生长组成了异质结构,实现了对注入载流子和发射光波在有源区的空间限制效应,大大提高了激光器的工作效率,使阈值电流密度降低了 2~3 个量级,突破了激光器在室温下连续工作的难关,为半导体光电子学的发展作出了历史性的贡献。早期的能带工程,空间范围还只是在光波尺度的量级。随着 MBE、MOCVD 技术的成熟以及人们对光电子、光子器件量子效应的深入研究,今天构建能带工程的空间范围已以晶体中电子德布罗意波为尺度,并由此研制开拓了品种丰富、性能优异的量子效应新器件,使半导体光电子进入了量子光电子学的新时代。

能带工程可以分为三个方面,即带隙工程、带结构工程和带偏移工程。能带工程所利用的效应主要有以下三种:

1. 合金效应,即利用二种或多种元素半导体、或利用两种或多种化合物半

导体材料组成的合金半导体材料;

2. 异质结构概念、量子尺寸效应及超晶格结构;
3. 应变效应,即利用失配异质材料的共格生长产生的内建应变调节能带结构。

这三种能带设计方法日益受到人们的重视。其中合金效应我们已在第二章中作过详细讨论。

在本章中,我们将以 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 系统为例,从理论上讨论量子尺寸效应及应变对半导体材料能带结构的影响,求出匹配 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 量子阱及应变 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 量子阱中的激跃迁能量。为后几章分析实验结果打下基础,并为用户提供器件设计提供重要的思路和理论方法。

§ 3.2 异质结的能带排列

在早期,可以生长出高质量的单晶半导体材料,却很难生长出突变异质结构材料。从本世纪七十年代开始,由于先进的外延生长技术如 *MBE* 和 *MOCVD* 等的诞生、发展和完善,在超薄、多层、高质量异质结构外延生长方面取得了巨大的进步。现已能在原子尺度范围内对异质结的界面进行控制。关于超薄层外延技术,将在第四章讨论。

利用异质结构概念可以形成量子阱、超晶格、量子线、量子点等结构,从而实现了人为地对能带结构进行剪裁和改变,为器件设计增添了新的,更多的自由度。

由于组成异质结构的两种半导体材料的禁带宽度不同,异质结的导带和价带出现能量不连续。异质结构器件的独特性能来源于用能量不连续对电子和空穴的分布和运动的控制。因此,异质结构的能带不连续参数是一个非常重要的物理量。

设半导体材料 *A* 和半导体材料 *B* 组成异质结,*A* 材料和 *B* 材料的禁带宽度分别为 E_g^A 和 E_g^B (假定 $E_g^A > E_g^B$); *A* 材料和 *B* 材料的导带边分别为 E_c^A 和 E_c^B , 价带边分别为 E_v^A 和 E_v^B 。导带和价带不连续量分别定义为:

$$\Delta E_c = E_c^A - E_c^B \quad (3-2-1)$$

$$\Delta E_v = E_v^A - E_v^B \quad (3-2-2)$$

按照异质结构的能带排列,可将异质结分为跨立型、错开型和破隙型三类,如图 3.2.1 所示。跨立型也称为 I 型异质结构,其特点是 ΔE_c 与 ΔE_v 异号,即

$$\Delta E_c \cdot \Delta E_v < 0 \quad (3-2-3)$$

错开型和破隙型也称为 II 型异质结构,其特点为 ΔE_c 与 ΔE_v 同号,即

$$\Delta E_c \cdot \Delta E_v > 0 \quad (3-2-4)$$

由于不同类型的能带排列具有不同的性质和器件应用。因此,对异质结构而言,确定能带排列的类型也非常重要。

由图 3.2.1 可见,对三种类型的异质结,能带不连续量与禁带宽度均有如下关系:

$$\Delta E_c - \Delta E_v = E_g^A - E_g^B = \Delta E_g \quad (3-2-5)$$

这说明 ΔE_c 和 ΔE_v 不是独立的,只要知道其中一个,另一个也就知道了。

图 3.2.1 也给出了由 A 和 B 交替组成的多层异质结构。由图可见,对 I 型多层异质结构,导带电子和价带空穴均限制在带隙较小的半导体材料中;对 II 型多层异质结构,导带电子和价带空穴限制在不同的半导体材料中,即导电子和价带空穴在空间上是分开的。

对器件应用而言,异质结构最重要的参数是能带不连续参数,目前已发展了多种确定异质结构能带不连续参数的理论方法^[1-6]。

§ 3.3 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理论及能带的非抛物性

3.3.1 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理论^[7-10]

由于 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 是窄带隙半导体材料,因此我们计算 $In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ 量子阱中的子能级时,必须考虑能带的非抛物性,即必须考虑导带和价带的相互作用,这就要用到 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理论。所以,下面首先对 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理论作一介绍。

研究半导体材料能带结构的方法很多,主要有^[11]① 紧束缚法;② 赝势法;

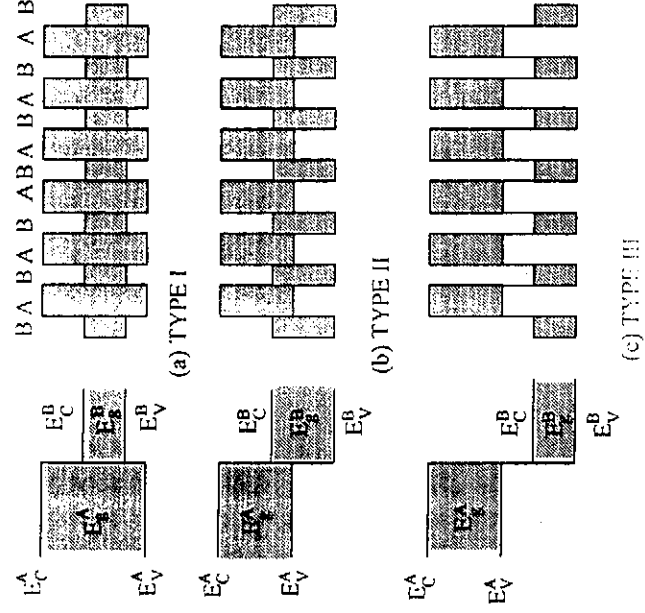


图 3.2.1 异质结构能带排列三种类型

③ $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 微扰法。 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 微扰法在这三种方法中具有简单, 直观等优点, 在半导体能带计算时被广泛使用。另外, 许多半导体能级的重要理论模型和方法也是在 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 微扰法的基础上发展起来的。

$\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理论的要在于, 将波矢空间中能带极值 $\vec{k}_0$ 附近的电子能态表达为 $\vec{k} = \vec{k}_0$ 处的原胞周期波函数 (Bloch 波函数中以原胞为周期的那一部分) 和能量本征值的函数。其基本概念可以通过周期势场中电子运动的薛定谔方程来说明。

根据单电子近似, 周期场中电子运动的哈密顿算符:

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \quad (3-3-1)$$

其中 $\vec{p}$ 为动量算符, $V(\vec{r})$ 为晶体的周期势, m_0 为自由电子质量。在 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理论中, 认为下面方程的解已知:

$$\hat{H}_0 \Psi_n(\vec{k}_0, \vec{r}) = E_n(\vec{k}_0) \Psi_n(\vec{k}_0, \vec{r}) \quad (3-3-2)$$

其中 $E_n(\vec{k}_0)$ 为 $\vec{k}_0$ 点的本征值, $\Psi_n(\vec{k}_0, \vec{r})$ 为 $E_n(\vec{k}_0)$ 所对应的本征态, n 为能带指数。根据 Bloch 定理, $\Psi_n(\vec{k}_0, \vec{r})$ 可以表示为

$$\Psi_n(\vec{k}_0, \vec{r}) = \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}) U_n(\vec{k}_0, \vec{r}) \quad (3-3-3)$$

其中 $U_n(\vec{k}_0, \vec{r})$ 是晶体原胞的周期性函数。

设 $\vec{k}_0$ 点附近 $\vec{k}$ 处的本征态为 $\Psi_n(\vec{k}, \vec{r})$, 相应的能量本征值为 $E_n(\vec{k})$, 则 $\Psi_n(\vec{k}, \vec{r})$ 和 $E_n(\vec{k})$ 满足薛定谔方程:

$$\hat{H}_0 \Psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = E_n(\vec{k}) \Psi_n(\vec{k}, \vec{r}) \quad (3-3-4)$$

$\Psi_n(\vec{k}, \vec{r})$ 和 $E_n(\vec{k})$ 是我们所要求解的。根据 Bloch 定理, $\Psi_n(\vec{k}, \vec{r})$ 可以写为:

$$\Psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) U_n(\vec{k}, \vec{r}) \quad (3-3-5)$$

把 (3-3-5) 代入 (3-3-4), 并利用 (3-3-1) 式和 $\vec{p} = -i\hbar \nabla$ 得:

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) U_n(\vec{k}, \vec{r}) = E_n(\vec{k}) U_n(\vec{k}, \vec{r}) \quad (3-3-6)$$

当 $\vec{k} = \vec{k}_0$ 时, 由 (3-3-6) 式可得:

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k}_0 \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) U_n(\vec{k}_0, \vec{r}) = E_n(\vec{k}_0) U_n(\vec{k}_0, \vec{r}) \quad (3-3-7)$$

由 (3-3-6) 式和 (3-3-7) 式可得:

$$[H_{\vec{k}_0} + H_{\vec{k}, \vec{p}}] U_n(\vec{k}, \vec{r}) = E_n(\vec{k}) U_n(\vec{k}, \vec{r}) \quad (3-3-8)$$

半导体

其中

$$H_{\vec{k}_0} = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k}_0 \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \quad (3-3-9)$$

也是在

$$H_{\vec{k}, \vec{p}} = \frac{\hbar}{m_0} (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) \quad (3-3-10)$$

表达为

和能量
来说明。
此完全系称为 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 表象。以 $U_n(\vec{k}_0, \vec{r})$ 组成的完全集为表象, 用方程 (3-3-8)

研究能带结构的方法称为 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 微扰法。

3-1)

利用 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 表象, $U_n(\vec{k}, \vec{r})$ 可以写为:

$$U_n(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_i A_m(\vec{k}) U_i(\vec{k}_0, \vec{r}) \quad (3-3-11)$$

理论中,

其中 i 为能带指数, $\sum_i$ 表示对所有的能带求和。把 (3-3-11) 代入 (3-3-8)

3-2)

8) 式可得:

$$\sum_i [E_i(\vec{k}_0) - E_n(\vec{k}) + \frac{\hbar^2 (k^2 - k_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{p}}{m_0}] A_m(\vec{k}) U_i(\vec{k}_0, \vec{r}) = 0 \quad (3-3-12)$$

3-3)

考虑能带边缘波函数的正交性, 得到 $A_m(\vec{k})$ 满足的方程:

$$\sum_i \left\{ [E_i(\vec{k}_0) - E_n(\vec{k}) + \frac{\hbar^2 (k^2 - k_0^2)}{2m_0}] \delta_m + \frac{\hbar (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{p}}{2m_0} \cdot \vec{p}_m \right\} A_m = 0 \quad (3-3-13)$$

($\vec{k}$), 则

3-4)

其中

$$\vec{P}_m = \int U_n^*(\vec{k}_0, \vec{r}) \vec{p} U_i(\vec{k}_0, \vec{r}) d\vec{r} \quad (3-3-14)$$

1) 写为:

3-5)

是不同带边缘波函数矩阵元。

得:

解久期方程 (3-3-13) 就可以求出 $\vec{k}$ 态的能量本征值和本征函数。由于 $\vec{k}_0$ 态可能具有无穷多个本征态, 计算能带时实际采用 Loudin^[12] 提出的方法来处理: 把 $\vec{k}_0$ 态分为两种, 一种态相互之间较近, 它们之间作用较强, 用精确处理; 另一种较远, 作用较弱, 用微扰处理。

3-6)

§ 3.3.2 导带和价带的相互作用及能带的非抛物性 (三带模型)^[8]

3-7)

应用 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 理论, 考虑到自旋——轨道相互作用, 我们有:

3-8)

$$\left\{ \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \left(\frac{\hbar}{m_0} \right) \vec{k} \cdot \vec{p} + \left(\frac{\hbar}{4m_0^2 C^2} \right) [\nabla V(\vec{r}) \times \vec{p}] \cdot \sigma + \left(\frac{\hbar^2}{4m_0^2 C^2} \right) \times [\nabla V(\vec{r}) \cdot \sigma] \right\} U_{\vec{k}}(\vec{r}) = E'_{\vec{k}} U_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3-3-15)$$

$$E'_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (3-3-16)$$

其中 $E_{\vec{k}}$ 是与波矢为 $\vec{k}$ 的态相对应的能量。方程(3-3-15)中的第三项是 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 相互作用项,第四项是与 $\vec{k}$ 有关的自旋—轨道相互作用项,第五项是与 $\vec{k}$ 无关的自旋—轨道相互作用项。由于第五项很小,故可将其忽略。

假定知道方程

$$\left[\frac{P^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] U_n(\vec{r}) = E_n U_n(\vec{r}) \quad (3-3-17)$$

的解,由于 $U_n(\vec{r})$ 组成一完备集,故我们用 $U_n(\vec{r})$ 作为表象,基函数的选取如表3.3.1所示,表中第一行的波函数分别与第二行的波函数简并。设晶体的对称轴

表 3.3.1 讨论导带与价带之间的相互作用时选取的基函数

导带边 (二度简并)	价带边(考虑到自旋,6度简并)			
$ zS \downarrow \rangle$	$ X - iY \rangle \uparrow / \sqrt{2} \rangle$	$ Z \downarrow \rangle$	$ X + iY \rangle \uparrow / \sqrt{2} \rangle$	
$ zS \uparrow \rangle$	$ X + iY \rangle \downarrow / \sqrt{2} \rangle$	$ Z \uparrow \rangle$	$ X - iY \rangle \downarrow / \sqrt{2} \rangle$	

为 x, y 和 z ,并使波矢 $\vec{k}$ 的方向沿 z 方向,则 8×8 相互作用矩阵可以写为:

$$\begin{bmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{bmatrix} \quad (3-3-18)$$

$$H = \begin{bmatrix} E_s & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_p - \Delta/3 & \sqrt{2}\Delta/3 & 0 \\ kP & \sqrt{2}\Delta/3 & E_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_p + \frac{\Delta}{3} \end{bmatrix} \quad (3-3-19)$$

其中 $\Delta > 0$,是价带的自旋——轨道分裂能量。 P 为实数,由下式定义:

$$P = -i \left(\frac{\hbar}{m_0} \right) \langle S | P_z | Z \rangle \quad (3-3-20)$$

$$\Delta = \frac{3\hbar i}{4\pi^2 C^2} \langle X | \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial x} P_y - \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial y} P_x | Y \rangle \quad (3-3-21)$$

E_s 和 E_p 是方程 (3-3-17) 的本征值, E_s 与导带相对应, E_p 与价带相对应。

从与 (3-3-19) 式相应的久期方程, 可以得到

$$E' = 0 \quad (3-3-21)$$

$$E'(E' - E_g)(E' + \Delta) - k^2 P^2 (E' + \frac{2}{3}\Delta) = 0 \quad (3-3-22)$$

其中

$$E_s = E_g, E_p = -\Delta/3 \quad (3-3-23)$$

E' 由式 (3-3-16) 定义, E_g 是禁带宽度。如果规定价带顶的能量为 E_v , 导带底的能量为 E_c , 则

$$(E' - E_v)(E' - E_c)(E' - E_v + \Delta) - k^2 P^2 (E' + \frac{2}{3}\Delta) = 0 \quad (3-3-24)$$

此式即为考虑到导带与价带相互作用后, 导带、轻空穴带及自旋—轨道分裂带的色散关系。我们计算 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 量子阱中的子能级时, 将用此式考虑因导带与价带之间的相互作用引起的导带和轻空穴带的非抛物性, 即考虑电子有效质量和轻空穴有效质量随能量的变化。

§ 3.4 量子阱中量子化能级的理论计算^[13-15]

在本节中, 将给出用包络函数有效质量近似方法求解半导体量子阱中量子化能级的方法。

设 A、B 为两种 III—V 族化合物半导体材料, 它们均具有直接带隙, A 材料的禁带宽度为 $E_g^A, E_g^A < E_g^B$ 。一般而言, A 和 B 具有极为相似的能带结构, 如图 3.4.1 所示。图中给出了与材料光学性质和输运性质密切相关的几个能带, 它们是重空穴带 (HH), 轻空穴带 LH, 自旋—轨道相互作用分裂带 SO 以及导带 C, Δ 表示自旋—轨道相互作用裂距。假定 A 和 B 形成 I 型异质结构, 则在 A 材料和 B 材料形成的量子阱中, 电子和空穴均限制在窄带隙材料 A 中。图 3.4.2 给出了由 A 和 B 所形成的量子阱的能带边随 z 变化的示意图, 其中 z 为生长方向上的位置坐标。由于考虑的是 A 材料和 B 材料均未有掺杂及量子阱中的量子化能级的情况, 因此, 量子阱界面附近的带边不发生弯曲。

$$f_n(z) = \begin{cases} A \cos k_A z, & |z| < \frac{Lz}{2} \\ B \exp\left[-k_B\left(z - \frac{Lz}{2}\right)\right], & z > \frac{Lz}{2} \\ B \exp\left[k_B\left(z + \frac{Lz}{2}\right)\right], & z < -\frac{Lz}{2} \end{cases} \quad (3-4-3)$$

或写成奇宇称波函数:

$$f_n(z) = \begin{cases} A \sin k_A z, & |z| < \frac{Lz}{2} \\ B \exp\left[-k_B\left(z - \frac{Lz}{2}\right)\right], & z > \frac{Lz}{2} \\ B \exp\left[k_B\left(z + \frac{Lz}{2}\right)\right], & z < -\frac{Lz}{2} \end{cases} \quad (3-4-4)$$

其中 Lz 为量子阱的宽度, k_A 和 k_B 为电子沿 z 方向运动的波矢, 它们由下式给出:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_A^2}{2m_A(z)} \quad (3-4-5a)$$

$$V_c - E_n = \frac{\hbar^2 k_B^2}{2m_B(z)} \quad (3-4-5b)$$

E_n 为导带量子阱中第 n 个能级的能量, $m_A(z)$ 和 $m_B(z)$ 为电子在 z 方向上运动的有效质量。

对偶宇称波函数应用前面提到的边界条件可得:

$$A \cos(k_A Lz/2) = B \quad (3-4-6a)$$

$$A[k_A/m_A(z)] \sin(k_A Lz/2) = B[k_B/m_B(z)] \quad (3-4-6b)$$

此二式可合为一式:

$$[k_A/m_A(z)] \operatorname{ctg}(k_A Lz/2) = -k_B/m_B(z) \quad (3-4-6c)$$

同样, 从奇宇称波函数满足边界条件可得:

$$[k_A/m_A(z)] \operatorname{ctg}(k_A Lz/2) = -k_B/m_B(z) \quad (3-4-6d)$$

由 (3-4-6c) 和 (3-4-6d) 两式可得:

$$\left(\zeta - \frac{1}{\zeta}\right) \sin(k_A Lz) = 2 \cos(k_A Lz) \quad (3-4-7a)$$

$$\zeta = \frac{k_A m_B(z)}{k_B m_A(z)} \quad (3-4-7b)$$

把 (3-4-5) 式和 (3-4-7) 式联立起来, 通过计算机数值求解, 即可求出导带量子阱中电子的子能级 E_n 。

考虑到电子在 xy 平面内的运动, 电子的色散关系可以写为:

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_n} \quad (3-4-8)$$

即由于电子在 z 方向上的运动受到限制,量子阱中电子的色散关系不再具有体材料的形式,而变成了二维子能带的形式,二维子能带的最低能量即为量子化能级 E_n ,即 E_n 与 $k_{\parallel} = 0$ 相对应。 m_n 为电子在 xy 平面内运动的有效质量,由下式给出:

$$\frac{1}{m_n} = \frac{1}{m_A}(1 - P_n) + \frac{1}{m_B}P_n \quad (3-4-9)$$

其中 P_n 为当电子处于第 n 个子带中时,在势垒中找到电子的积分几率; m_A 和 m_B 为电子在 xy 平面内运动的有效质量。

从(3-4-8)式所表示的二维子带的色散关系及态密度的定义,容易求出量子阱中电子的态密度与能量 E 之间的关系为:

$$D(E) = \sum_n D_n(E) \quad (3-4-10a)$$

$$D_n(E) = \frac{m_n S}{\pi \hbar^2} y(E - E_n) \quad (3-4-10b)$$

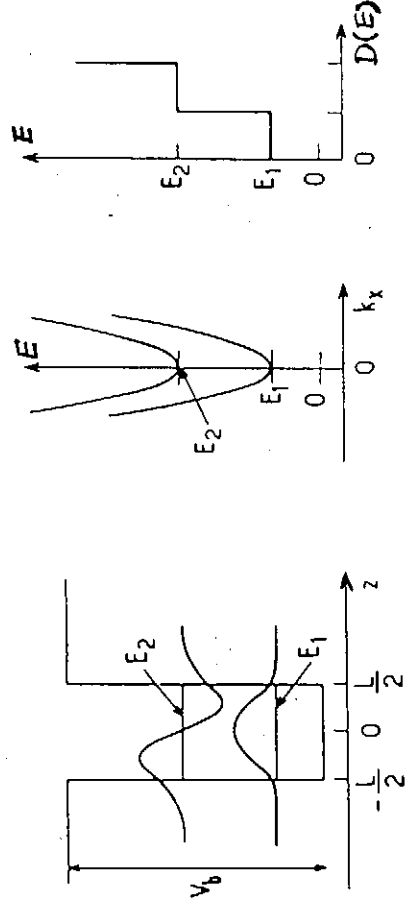


图 3.4.3 (a) 量子阱中的子能级及包络函数;(b) 量子阱中的二维子带;(c) 量子阱中的台阶态密度。

其中 S 为样品的面积; $y(x)$ 为台阶函数,当 $x > 0$ 时, $y(x) = 1$,当 $x < 0$ 时, $y(x) = 0$; $\sum_n$ 表示对量子阱中的所有二维子能带求和。由(3-4-9)可以看出,量子阱中电子的态密度随能量的变化曲线具有台阶形状,这一台阶态密度来源于量子阱中二维子带的色散关系,它与体材料中态密度与能量之间的关系很不相同,量子阱的很多独特性质来源于台阶状的态密度。

量子阱中电子的子能级、包络函数、二维子带及台阶态密度总结在图

3.4.3 中。

3.4.2 量子阱中的价带结构

3.4.2.1 量子阱中的子能级 ($k_y = 0$)

当 $k_y = 0$ 时 (Γ 点), $J_z = \pm 3/2$ 的重空穴带和 $J_z = \pm 1/2$ 的轻空穴带之间是不耦合的, 因而可以分开处理, 并且它们仍分别保持 $J_z = \pm 3/2$ 和 $J_z = \pm 1/2$ 带的特性。然而 $\Gamma = 0$ 处简并的轻、重空穴价带的有效质量不同, 量子阱中它们受到限制的效应也不同, 能级分裂的大小不相等。这样, 对量子阱来说, 布里渊区中心处轻、重空穴价带的简并消除了。上面的一支为角动量 $J_z = \pm 3/2$ 的分布较密的重空穴子带, 下面的一支为角动量 $J_z = \pm 1/2$ 的分布较疏的轻空穴子带, 如图 3.4.4 所示。下面以重空穴为例, 说明量子阱中 $k_y = 0$ 的空穴量子化能级的计算方法。

重空穴的包络函数 $f_{hh}(z)$ 满足的有效质量方程为:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_{hh}(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V_p(z) \right\} f_{hh}(z) = E_n f_{hh}(z) \quad (3-4-11)$$

规定重空穴价带顶的能量为零, $m_{hh}(z)$ 为 z 方向上重空穴的有效质量, $V_p(z)$ 为重空穴价带边的能量, 象求解方程 (3-4-2) 一样, 容易求出确定 E_n 的关系式:

$$E_n = \hbar^2 k_A^2 / 2m_{hh}(A) \quad (3-4-12a)$$

$$V_p - E_n = \hbar^2 k_B^2 / 2m_{hh}(B) \quad (3-4-12b)$$

$$\left(\xi - \frac{1}{\xi} \right) \sin k_A L_z = 2 \cos k_A L_z \quad (3-4-12c)$$

$$\xi = \frac{k_A m_{hh}(B)}{k_B m_{hh}(A)} \quad (3-4-12d)$$

把 (3-4-12) 中的重空穴有效质量 m_{hh} 换为轻空穴有效质量 m_{lh} , 即可求出量子阱中轻空穴在 $k_y = 0$ 处的能级。可见, 除了有效质量不同以外, 求解 $k_y = 0$ 处的电子能级, 重空穴及轻空穴能级的公式完全同。重空穴及轻空穴的带边有效质量由 Luttinger 参数 γ_1 和 γ_2 和 γ_3 给出:

4-8)

具有体

子化能

下式给

4-9)

γ_A 和 m_B

易求出

-10a)

-10b)

阱中的

$\Gamma, y(x)$

子, 量子

来源于

很不相

吉在图

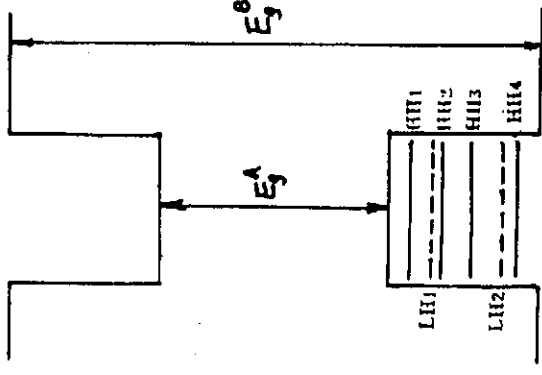


图 3.4.4 Γ 点附近量子阱中空穴量子化能级示意图

$$m_{hh} = m_0 \begin{cases} (\gamma_1 - 2\gamma_3)^{-1}, [111] \text{ 方向;} \\ (\gamma_1 - 2\gamma_2)^{-1}, [001] \text{ 方向;} \\ (\gamma_1 - (\gamma_2^2 + 4\gamma_3^2)^{1/2})^{-1}, [110] \text{ 方向} \end{cases} \quad (3-4-14)$$

$$m_{hh} = m_0 \begin{cases} (\gamma_1 + 2\gamma_3)^{-1}, [111] \text{ 方向;} \\ (\gamma_1 + 2\gamma_2)^{-1}, [001] \text{ 方向;} \\ (\gamma_1 + (\gamma_2^2 + 4\gamma_3^2)^{1/2})^{-1}, [110] \text{ 方向} \end{cases} \quad (3-4-15)$$

3.4.2.2 空穴量子阱中的二维子能带

由于轻空穴带和重空穴带的相互耦合,点 Γ 以外布里渊区其它位置的空穴子带的情况要复杂得多,通常可用 Kohn - Luttinger^[16,17] 形式的 Schrodinger(KL) 方程来求解.KL 方程为:

$$(\hat{H} + Vp)\Psi = E\Psi \quad (3-4-16)$$

对 Γ_8 价带, $(\hat{H} + Vp)$ 为 4×4 矩阵:

$$H = \begin{bmatrix} H_{hh} & c & b & 0 \\ c^* & H_{lh} & 0 & -b \\ b^* & 0 & H_{lh} & C \\ 0 & -b^* & c^* & H_{hh} \end{bmatrix} \begin{matrix} \frac{3}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{3}{2} \end{matrix}$$

其中

$$H_{hh} = -\frac{1}{2m_0}P_z(\gamma_1 - 2\gamma_2)P_z + Vp(z) - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0}(\gamma_1 + \gamma_2) \quad (3-4-18a)$$

$$H_{lh} = -\frac{1}{2m_0}P_z(\gamma_1 + 2\gamma_2)P_z + Vp(z) - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0}(\gamma_1 - \gamma_2) \quad (3-4-18b)$$

$$c(\vec{k}_{\parallel}, z) = \frac{\hbar^2}{m_0} \sqrt{3} \frac{1}{2} \{ \gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y \} \quad (3-4-18c)$$

$$b(\vec{k}_{\parallel}, z) = \frac{1}{2} \sqrt{3} \frac{\hbar}{m_0} (k_x - ik_y)(\gamma_3 P_z + P_z \gamma_3) \quad (3-4-18d)$$

$Vp(z)$ 表示价带边的能量位置, $P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$.

空穴的

 $\Psi_h^m(\vec{k})$ 其中, $\sum_V$

分。

与(3

空穴带和

式。另外,

平面内的

空穴的有

3.5 匹

要计

 $In_{0.53}Ga_{0.47}$

激子束缚

3.5.1

所谓

互作用的

体半导体

的激子

子,另

Frenkel

数的空

为几

Heisenb

处理这

扩展范

图 3.5.

中起重

后简称

空穴的波函数可以写为:

$$\Psi_h^m(\vec{k}_{\parallel}, \vec{r}) = \sum_{\nu} f_{\nu}^m(z) U^{\nu}(\vec{r}) \exp i \vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{\rho} \quad (3-4-14)$$

其中, $\sum_{\nu}$ 表示对价带求和, $U(\vec{r})$ 为价带 Bloch 函数中的具有晶格周期性的部分。

与 (3-4-17) 相应的久期方程可用有限差分方法求解。在对角近似下, 重空穴带和轻空穴带解耦, 重空穴带和轻空穴带具有与式 (3-4-8) 相同的形式。另外, 由 (3-4-18a) 和 (3-4-18b) 可以看出, 在对角近似下: ① 在 xy 平面内的有效质量出现反转效应, 即在 xy 平面内, 重空穴的有效质量较小, 而轻空穴的有效质量大; ② 在 xy 平面内的有效质量不同于在 z 方向上的有效质量。

重空穴
形式的

3.5 匹配量子阱中的激子束缚能^[18-21]

要计算 $In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ 量子阱中的激子跃迁能量, 还必须知道 $In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ 量子阱中的激子束缚能。因此, 下面我们讨论匹配量子阱中的激子束缚能。

3.5.1 三维激子

所谓激子, 就是有库仑相互作用的电子——空穴对。在体半导体材料中, 有两种类型的激子, 一种称为 Frenkel 激子, 另一种称为 Mott 激子。

Frenkel 激子的周期性包络函数的空间扩展范围很小, 通常为几个晶格常数, 根据 Heisenberg 的测不准原理, 要

处理这样的激子必须涉及半导体材料的整个能带结构。Mott 激子的包络函数的扩展范围达数百埃, 因此, 要描述 Mott 激子只需要带边附近的电子态和空穴态。图 3.5.1 给出了半导体材料中 Mott 激子和 Frenkel 激子的示意图。在半导体材料中起重要作用的激子是 Mott 激子, 我们在下面要讨论的激子也是 Mott 激子, 此后简称激子。体材料中的激子是三维激子, 三维激子的运动状态可以用如下的在

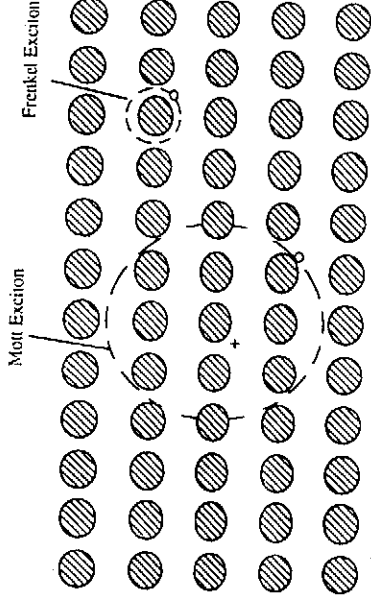


图 3.5.1 Mott 激子和 Frenkel 激子示意图

效质量方程来描述:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right] \Psi_{ex} = E \Psi_{ex} \quad (3-5-1)$$

方程(3-5-1)和氢原子方程相似。象氢原子一样,可以将激子运动分为两部分,即激子质心的运动和激子中电子——空穴的相对运动,质心运动的质量和坐标分别为:

$$M = m_e + m_h \quad (3-5-2a)$$

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_e + m_h \vec{r}_h}{m_e + m_h} \quad (3-5-2b)$$

相对运动的有效质量和坐标则为

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (3-5-3a)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad (3-5-3b)$$

由于库仑相互作用势不具有平移对称性,激子中电子——空穴的相对运动不再有明确定义的准动量。然而,库仑互作用不涉及到质心坐标 $\vec{R}$,因而质心运动仍具有明确的准动量。这样,可以将激子包络波函数写为上述两部分运动波函数之积,即

$$\Psi_{ex}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \Phi(\vec{R}) \Psi(\vec{r}) \quad (3-5-4)$$

其中质心运动部分

$$\Phi(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp(i\vec{K} \cdot \vec{R}) \quad (3-5-5)$$

$$E_{\text{质心}} = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + E_g \quad (3-5-6)$$

相对运动部分

$$\Psi(\vec{r}) = R_n(\vec{r}) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3-5-7)$$

$$E_n = -\frac{R^*}{n^2} \quad (3-5-8)$$

式中 R^* 为激子的等效里德伯(Rydberg)能量,

$$R^* = \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2} = \frac{\mu}{\epsilon_r^2} \cdot 13.6 \text{ eV} \quad (3-5-9)$$

R_n 为拉盖尔多项式, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 为球谐函数,激子的总能量为

$$E_n(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{R^*}{n^2} \quad (3-5-10)$$

类似于氢原子的情况,从式(3-5-7)给出的波函数,可以估计半导体中

激子态的空间扩展范围,它可以用激子态的等效玻尔半径

$$a_B^* = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{m_0\epsilon_r a_B}{\mu} \quad (3-5-11)$$

来描述,式中 a_B 为氢原子的玻尔半径。

3.5.2 二维激子

纯二维激子包络函数满足的 Schrodinger 方程为:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Phi(x,y) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon(x^2 + y^2)^{1/2}} = E\Phi(x,y) \quad (3-5-12)$$

极坐标系中,满足方程 (3-5-12) 的波函数可以写为:

$$\Phi(x,y) = (2\pi)^{-1/2} R(r) e^{im\theta} \quad (3-5-13)$$

式中 m 为整数,将上式代入式 (3-5-12),并分离变数可得波函数径向部分 $R(\vec{r})$ 满足的方程为:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\parallel}} \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) - \frac{m^2}{r^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right\} R(r) = ER(r) \quad (3-5-14)$$

令

$$R(r) = e^{-\frac{1}{2}\rho} \cdot F(\rho) \quad (3-5-15)$$

并且

$$\rho = \frac{r}{a_B^* \lambda}; \lambda^{-2} = -4w; w = E/R^* \quad (3-5-16)$$

则方程 (3-5-14) 可进一步写为

$$\rho \frac{d^2 F}{d\rho^2} + (1-\rho) \frac{dF}{d\rho} + \left(2\lambda - \frac{1}{2} - \frac{m^2}{2}\right) F = 0 \quad (3-5-17)$$

其中 a_B^* 为等效玻尔半径, R^* 为等效里德堡能量,它们的定义同三维情况一致。

考虑 $E < 0$, 即束缚态的自由激子。在这种情况下, $\lambda = \frac{1}{2\sqrt{-w}}$ 为实数,

方程 (3-5-17) 为拉盖尔 (Laguerre) 微分方程,其解为连带的拉盖尔多项式

$$L(\rho) = L_{n+|m|}^{2m+1}(\rho), \quad |m| \leq n \quad (3-5-18)$$

式中 n 为包括零在内的正整数,它和 λ 有关

$$n = 2\lambda - \frac{1}{2} \quad (3-5-19)$$

这样可以求得方程 (3-5-12) 的本征值或本征能量为

$$E_n = -R^2 / \left(n + \frac{1}{2}\right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3-5-20)$$

导体中

归一化的本征函数为

$$\Phi_{n,m}(r) = \left[\frac{(n-|m|)!}{\pi a_B^{*2} (n + \frac{1}{2})^3 [(n+|m|)!]^3} \right]^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^{|m|} L_{n+|m|}^{2|m|}(\rho) e^{im\phi} \quad (3-5-21)$$

令 $n = m = 0$, 则得二维激子的 1S 波函数

$$R(r) = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{2}{a_B^*} \exp\left(-\frac{2r}{a_B^*}\right) \quad (3-5-22)$$

式(3-5-20)表明,二维激子在二维禁带宽度以下引入一系列的分立能级。和三维情况相比,维数下降的效应是使激子能量本征值表达式的分母中以 $(n+1/2)$ 代替 n^2 , 这样,激子基态(1S)束缚能为 $4R^*$, 即三维情况的 4 倍。

3.5.3 量子阱中的激子

完善描述量子阱中的激子颇不容易,原因在于:①阱层总有一定的厚度,库仑作用使阱层平面内的运动和垂直于阱层方向的运动互相耦合,因而量了阱中的激子,既非三维激子,又非严格意义上的二维激子。②严格说来,激子和所有的电子子带及空穴子带耦合,即使作出简化,限于研究一组子带,但由于价带子带的复杂性和 $k_{\parallel} \neq 0$ 处轻、重空穴子带的混合,阱层平面方向的空穴运动并不能用一个恒定的有效质量来描述。并且,即使在 $k = 0$ 处,库仑作用也使价带上部的两类子带混合。③由于波函数渗透到势垒区域,必须考虑阱内外有效质量的不同,它对垂直和平行于阱层方向的运动都有影响,只是对前者的影响更大一些。

常用变分法讨论量子阱中激子的运动,讨论的出发点仍是 *Luttinger* 和 *Kohn* 的有效质量方程。一般情况下,激子哈密顿量可表为 6×6 矩阵,但如果自旋——轨道分裂 Δ 远大于激子束缚能,便可忽略分裂价带的影响,因而激子哈密顿量降为 4×4 矩阵。在量子阱情况下,由于生长方向对称性的下降和界面处能带不连续性的存在,价带简并消除了,可以假定这种子带分裂足够大,以致它们之间相互耦合的库仑束缚能可以忽略不计。这样,在讨论激子形成时,可暂且把这些子带或能级看作是相互独立的,并可用简约质量描述,因而形成两个系列的激子,即重空穴激子和轻空穴激子,它们分别与原来价带顶处的 $J_z = \pm 3/2$ 的子带及 $J_z = \pm 1/2$ 的子带相联系。还可假定哈密顿量中非对角项对激了束缚能的贡献可以忽略,于是在有效质量近似情况下,单势阱中重、轻空穴激子的哈密顿

量,在柱坐标系中可以写为:

$$H_{xx} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\pm}} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_{\pm}} \cdot \frac{\partial^2}{\partial z_{\pm}^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + V_{conf,e} + V_{conf,h} \quad (3-5-23)$$

式中 m_e 为导带电子有效质量, $m_{\pm}$ 为沿 z 方向的重空穴(+)和轻空穴(-)有效质量; $\mu_{\pm}$ 是垂直于 z 轴的平面内重空穴(+)和轻空穴(-)带的约化质量, $m_{\pm}$ 和 $\mu_{\pm}$ 可用 Luttinger 参数 γ_1 和 γ_2 表示如下:

$$\frac{1}{m_{\pm}} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 \mp 2\gamma_2) \quad (3-5-24a)$$

$$\frac{1}{\mu_{\pm}} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_0} (\gamma_1 \pm \gamma_2) \quad (3-5-24b)$$

$\vec{r}_e$ 与 $\vec{r}_h$ 为电子与空穴的位矢, ρ , ϕ 和 z 为柱坐标系内的相对坐标, m_0 为自由电子质量, $V_{conf,e}$ 和 $V_{conf,h}$ 由下式给出:

$$V_{conf,e} = \begin{cases} 0, & |z_e| < L_z/2 \\ V_e, & |z_e| > L_z/2 \end{cases} \quad (3-5-25a)$$

$$V_{conf,h} = \begin{cases} 0, & |z_h| < L_z/2 \\ V_h, & |z_h| > L_z/2 \end{cases} \quad (3-5-25b)$$

激子的试解波函数可以写为:

$$\Psi_{ex}(a, \lambda) = \Psi_e(Ze) \Psi_h(Z_h) \Phi_{ex}(\rho, z), \quad (3-5-26a)$$

$$\Phi_{ex}(\rho, z) = \exp\left[-\frac{1}{a} \sqrt{\rho^2 + \lambda^2 z^2}\right], \quad (3-5-26b)$$

其中 $\Psi_e(z_e)$ 和 $\Psi_h(z_h)$ 为有限深方阱及势垒中电子和空穴的包络波函数, $\Phi_{ex}(\rho, z)$ 是描述激子中电子——空穴相对运动的波函数, a 和 λ 为变分参数。根据变分原理,可以求出激子的基态能量为:

$$E = \min_{a, \lambda} \left[\frac{\langle \Psi_{ex} | H_{ex} | \Psi_{ex} \rangle}{\langle \Psi_{ex} | \Psi_{ex} \rangle} \right] \quad (3-5-27)$$

$\min_{a, \lambda} f(a, \lambda)$ 表示以 a 和 λ 为自变量求函数 $f(a, \lambda)$ 的极小值。激子的束缚能由下式给出:

$$E_b = E_{1e} - E_{1h} - \min_{a, \lambda} \left[\frac{\langle \Psi_{ex} | H_{ex} | \Psi_{ex} \rangle}{\langle \Psi_{ex} | \Psi_{ex} \rangle} \right] \quad (3-5-28)$$

在势垒中找到激子的几率下式给出:

$$P_{barrier} = \left[1 - \int_{well} \Psi_{ex}^2 dv \right] / \langle \Psi_{ex} | \Psi_{ex} \rangle \quad (3-5-29)$$

变分参数 λ 用来描述激子在 xy 平面内的线度与其在 z 方向线度的差别,它是激

王晓亮
§ 3.6 In
计算

子维数的量度,对 3D 激子($L_z \rightarrow 0, L_z \rightarrow \infty$), $\lambda \rightarrow 1$;对二维激子($V_h, V_h \rightarrow \infty, L_z \rightarrow 0$), $\lambda \rightarrow 0$ 。量子阱中的激子既非二维激子又非三维激子,因此 $0 < \lambda < 1$ 。变分参数 a 是激子的波尔半径。

用表 3.5.1 中的参数进行计算,可得 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 匹配量子阱中轻、重空穴激子束缚能随阱宽而变化的曲线,如图 3.5.2 所示。

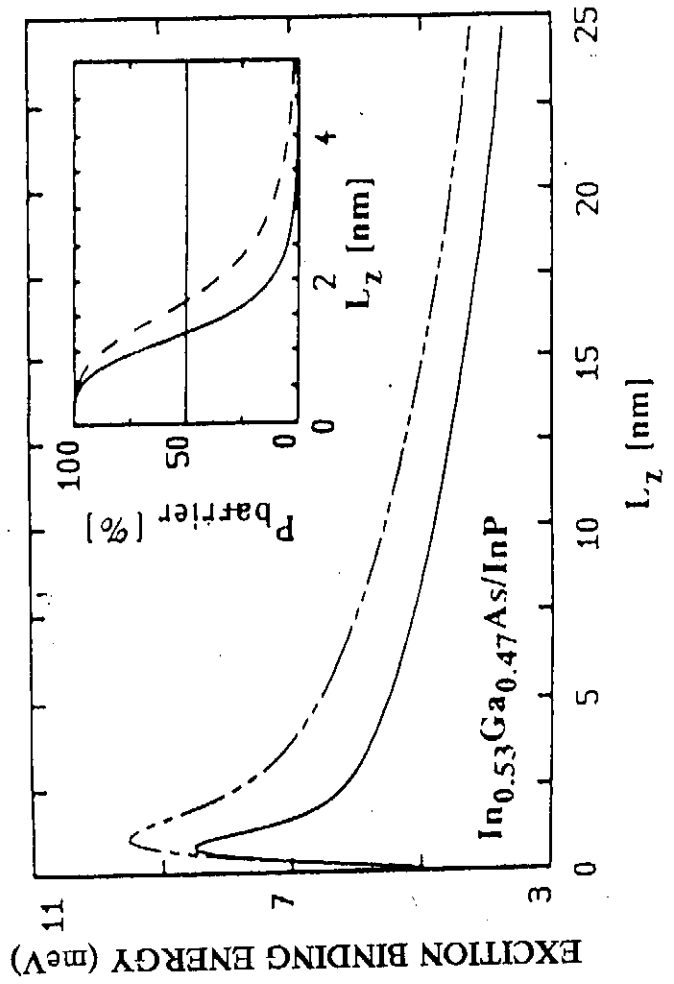


图 3.5.2 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 匹配量子阱中激子的束缚能.实线表示重空穴激子,虚线表示轻空穴激子.插图表示在 InP 垒中找到激子的几率。

表 3.5.1 Material Parameters of $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ and InP used in the calculation (4K values) of Grundmann and Bimberg^[20]

Material	E _g (ev)	V _e /ΔE _g	γ ₁	γ ₂	m _e	ε _r
InP	1.423		5.15	0.94	0.0803	12.6
In _x Ga _{1-x} As	0.813	40%	11.01	4.18	0.041	13.9
In _{0.53} Ga _{0.47} As						

§ 3.6 In_xGa_{1-x}As/InP 匹配量子阱中激子跃迁能量的理论计算

计算用参数列于表 3.6.1 中。

表 3.6.1 计算用参数。

Name	InP	GaAs	InAs	In _{0.53} Ga _{0.47} As
$a(\text{\AA})$	5.8687 ^[18]	5.65325 ^[18]	6.0583 ^[18]	
$E_g(\text{eV})$	1.424 ^[31]	1.519 ^[31]	0.418 ^[31]	0.812 ^[32]
$\Delta_0(\text{eV})$	0.11 ^[31]	0.34 ^[31]	0.37 ^[31]	
$m_e^*(e, m, u.)$	0.079 ^[31]	0.067 ^[31]	0.023 ^[31]	
$m_{LH}^*(e, m, u.)$	0.121 ^[33]	0.094 ^[33, 34]	0.027 ^[33]	
$m_{HH}^*(e, m, u.)$	0.606 ^[33]	0.341 ^[33, 34]	0.4 ^[33]	
Valence band offset relative to InP(eV)	0	0.34 ^[36]	0.41 ^[36]	
$C_{11}(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$		12.11 ^[31]	8.541 ^[38]	
$C_{12}(10^{11} \text{ dyn/cm}^2)$		5.48 ^[31]	4.66 ^[38]	
$dE_g/dp(10^{-6} \text{ eV cm}^2/\text{kg})$		11.3 ^[31]	9.8 ^[31]	
$a_c(\text{eV})$		-7.1 ^[36]	-5.4 ^[36]	
$b_v(\text{eV})$		-1.7 ^[31]	-1.8 ^[31]	
ϵ_r		10.9 ^[31]	15.15 ^[31]	
$E_B^{LM}(\text{meV})$				9 ^[37]

In_{0.53}Ga_{0.47}As 是窄带半导体材料, 因此, 计算过程中必须考虑由于导带和价带相互作用所引起的轻粒子带(导带和轻空穴价带)的非抛物带效应。考虑到非抛物带效应时, 有效质量是能量 E 的函数, 此时:

$$m(E) = \hbar k^2(E)/2E \quad (3-6-1)$$

其中 $k(E)$ 由 (3-3-24) 式给出的 Kane 色散关系确定, 动量跃迁矩阵元 P (见式 (3-3-20)) 由表 3.6.1 给出的带边有效质量确定。计算得到的垒材料 InP 和阱材料 In_{0.53}Ga_{0.47}As 中轻粒子(电子和轻空穴)有效质量与能量 E 之间的关系如图 3.6.1 所示。由图可见: ① 随着能量 E 的增大, 电子和轻空穴的有效质量均增大, 也就是说, 考虑到非抛物带效应, 轻粒子的有效质量将会增大; ② 在两种材料中, 电子有效质量与能量 E 之间的关系均近似为线性关系; ③ 轻空穴的有效质量随着能量 E 的增加很快增加。

量子阱中与第 n 个量子化能级相应的重空穴激子的跃迁能量由下式给出:

$$E_{ex}(nH) = E_g + E_{ne} + E_{nH} - E_{exH} \quad (3-6-2)$$

其中 E_g 为阱材料 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 的禁带宽度, E_{ne} 为导带量子阱中的第 n 个量子化能级(取阱材料导带底为能量零点), E_{nH} 为价带重空穴带量子阱中的第 n 个量子化能级(取价带顶为能量零点), E_{exH} 为量子阱中的重空穴激子束缚能。

量子阱中与第 n 个量子化能级相应的轻空穴激子的跃迁能量由下式给出:

$$E_{ex}(nL) = E_g + E_{ne} + E_{nL} - E_{exL} \quad (3-6-3)$$

其中 E_{nL} 为价带量子中的第 n 个轻空穴能级, E_{exL} 为量子阱中的轻空穴激子的束缚能。

利用公式(3-4-5)及(3-4-7), 通过计算机数值求解可得 E_{ne} ; 同样, 利用公式(3-4-12)可求出 E_{nH} 和 E_{nL} 。由图 3.5.2 可得 $In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ 量子阱中轻空穴激子及重空穴激子的束缚能。

图 3.6.2 给出了计算得到的 $In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP$ 量子阱中的激子跃迁能量与量子阱阱宽之间的关系, 图中虚线表示不考虑轻粒子带非抛物带效应时的计算结果, 实线表示考虑到轻粒子带的非抛物带效应后的计算结果。由图可见:

- ① 随着阱宽的增大, 阱中激子跃迁能量减小; 阱中激子跃迁能量减小的速率随着阱宽的增大而减小。
- ② 在阱宽相同的情况下, 对于给定的量子化能级, 考虑非抛物带效应时的激子跃迁能量将小于不考虑非抛物带效应时的激子跃迁能量。
- ③ 对于基态跃迁($1e \rightarrow 1H$), 考虑和不考虑非抛物带效应所引起的跃迁能量的差别甚小; 对非基态跃迁, 这种差别则较大。因此, 对基态跃迁, 我们可忽略非

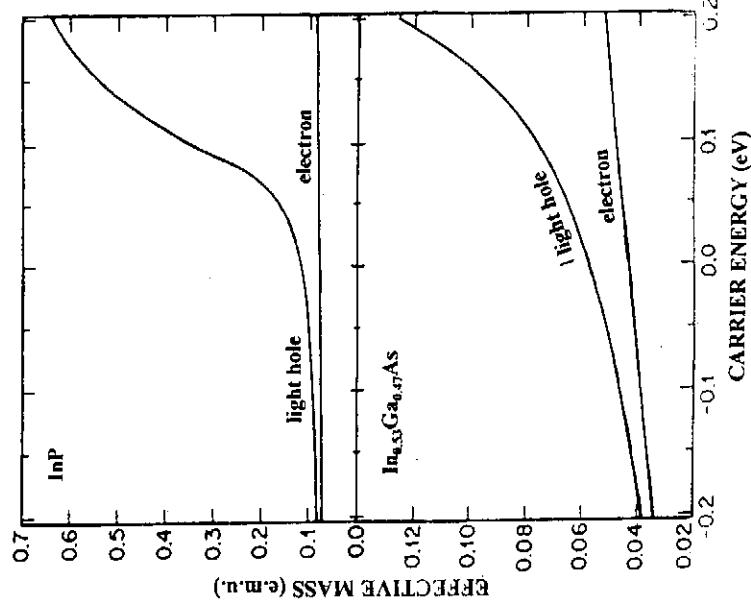


图 3.6.1 计算得到的 InP 和 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 中电子和轻空穴的有效质量随能量 E 的变化。能量零点选在各自的能带边。

在
根
3.7.1
应变张量
晶体
§ 3.7
抛物带效
在后
考虑
图 3.4

给出:
6-2)
量子化
量子

给出:
6-3)

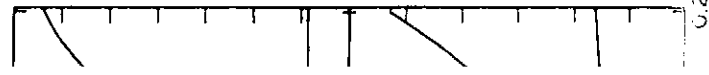


图 3.6.2 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 量子阱中激子跃迁能量随阱宽的变化关系,虚线表示不考虑非抛物带效应时的计算结果,实线表示考虑到非抛物带效应时的计算结果。

抛物带效应的影响;对非基态跃迁,则应该考虑非抛物带效应对能量的影响。
在后续章节中,将把实验结果与该理论计算结果进行对比。

§ 3.7 应力、应变及弹性常数

晶体是各向异性介质,描述晶体性质的物理量,一般是张量。下面,首先给出应变张量,然后给出应力张量,最后给出弹性常数。

3.7.1 应变张量

根据固体物理学,一个物体的应变由一个对称的二级张量 $\vec{e}$ 来描述:

$$\vec{e} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{12} & e_{22} & e_{23} \\ e_{13} & e_{23} & e_{33} \end{bmatrix} \quad (3-7-1)$$

在 $\vec{e}$ 的诸元素中,只有 6 个元素是独立的。如果用 x, y, z 代表位矢 $\vec{r}$ 的三个

忽略非

分量; u, v, w 代表位移矢 $\vec{\xi}$ 的三个分量, 那么这六个张量元可以写成:

$$\left. \begin{aligned} e_{11} &= \frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} = \frac{\partial u}{\partial x} = e_{xx} \\ e_{22} &= \frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} = \frac{\partial v}{\partial y} = e_{yy} \\ e_{33} &= \frac{\partial \xi_3}{\partial x_3} = \frac{\partial w}{\partial z} = e_{zz} \\ e_{23} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_2} + \frac{\partial \xi_2}{\partial x_3} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) = e_{yz} \\ e_{31} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_3} + \frac{\partial \xi_3}{\partial x_1} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = e_{zx} \\ e_{12} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} + \frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) = e_{xy} \end{aligned} \right\} \quad (3-7-2)$$

由形变引起的体积的相对增量称体膨胀(体应变), 其大小为:

$$\delta = \frac{V' - V}{V} = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \quad (3-7-3)$$

由于应变张量是个对称的二级张量, 只有六个独立的元素, 因此常被写成一个纵列矩阵, 用 U_λ 代表张量元, 用一个新足标 $\lambda=1, 2, 3, \dots, 6$ 来代替原来的足标, 其对应关系如下:

U_1	U_2	U_3	U_4	U_5	U_6
e_{xx}	e_{yy}	e_{zz}	$2e_{yz}$	$2e_{zx}$	$2e_{xy}$

$$(3-7-4)$$

3.7.2 应力张量

固体形变时, 作用在固体中单位面积上的力称为应力。应力是一个二阶张量, 其各个分量为 $\sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{yx}, \sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zy}, \sigma_{zx}, \sigma_{xz}, \sigma_{zy}, \sigma_{yz}$, 写成矩阵的形式即为:

$$\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (3-7-5)$$

张量元的前一个足标代表应力的方向, 后一个足标代表应力所作用的面的法向, 如图 3.7.1 所示。对角元素所代表的应力是垂直于表面的, 代表张力或压力; 非对角元素所代表的应力是沿着表面的, 即平行于表面的切向, 代表切应力。

内应力
于零, 因此

σ_{yz}

因此,
张量, 它只
以, 也常常
矩阵, 以 T
其对应关系

T_1	T_2
σ_{xx}	σ_{yy}

应力

点不同, 当

3.7.3

根据

量的线性

T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6
-------	-------	-------	-------	-------	-------

式中

量元数

目还会减

称类型

同中

内应力作用在物体上的总力矩等于零,因此,存在如下关系:

$$\sigma_{yz} = \sigma_{zy}, \sigma_{xz} = \sigma_{zx}, \sigma_{xy} = \sigma_{yx}$$

因此,应力张量也是对称的二级张量,它只有六个独立的张量元。所以,也常常把应力张量写成一个纵列矩阵,以 T_λ 来表示 ($\lambda = 1, 2, \dots, 6$),其对应关系为:

T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6
σ_{xx}	σ_{yy}	σ_{zz}	σ_{yz}	σ_{zx}	σ_{xy}

$$(3-7-6)$$

应力张量和应变张量的情况有一

点不同,当 $\lambda = 4, 5, 6$ 时, $T_\lambda = \sigma_{ij} (i \neq j)$, 而 $S_\lambda = 2e_{ij} (i \neq j)$ 。

3.7.3 弹性常数

根据虎克定律,在弹性限度内,应力与应变成正比,因此应力分量是应变分量的线性函数,用矩阵表示则为:

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \\ U_5 \\ U_6 \end{bmatrix} \quad (3-7-7)$$

式中 C_{ij} 称为弹性顺服常数。可以证明, $C_{ij} = C_{ji}$ 所以弹性硬度常数的独立张量元数目至多只有 21 个(三斜晶体),随着晶系的对称性增加,独立张量元的数目还会减少,而且独立张量元 C_{ij} 的数目主要与晶系有关,而与晶系中具体的对称类型无关。

同样,应变分量也是应力分量的线性函数:

常数为 a_B 。

假定衬底为

如图 3.8.1

$$(3-7-8)$$

$$e_{xx} =$$

$$e_{zz} =$$

$$e_{xy} =$$

$$e_{//} =$$

$$e_{\perp} =$$

$$\nu =$$

B

A

$$(3-7-10)$$

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}$$

立方晶系的弹性顺服常数 $[S]$ 也具有 (3-7-10) 式的形式, 即只有三个独立的分量 S_{11} , S_{12} 和 S_{44} 。由 (3-7-9) 式可得立方晶系 C_{ij} 和 S_{ij} 之间的关系为:

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(2C_{12} + C_{11})(C_{11} - C_{12})} \quad (3-7-11a)$$

$$S_{12} = \frac{-C_{12}}{(2C_{12} + C_{11})(C_{11} - C_{12})} \quad (3-7-11b)$$

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}} \quad (3-7-11c)$$

其中

$$e_{xz}, e_{xy}, e_{yz}$$

§ 3.9

§ 3.8 平面双轴应变张量

在失配异质结构材料的外延生长过程中, 我们遇到的应变通常是由于晶格失配引入的平面双轴应变。下面, 我们将求出在共格生长情况下, 平面双轴应变张量元的大小。

设衬底为半导体材料 A, 其晶格常数为 a_A ; 外延层为半导体材料 B, 其晶格

常数为 a_B 。如果外延层 B 的厚度不超过其临界厚度, 则 B 共格生长在衬底 A 上。假定衬底为半无限厚, 则外延层在生长平面内的晶格常数等于衬底的晶格常数, 如图 3.8.1 所示。如果衬底的晶向为 (001), 生长方向为 z 方, 则有:

$$e_{xx} = e_{yy} = e_{\parallel} = \frac{a_A - a_B}{a_B} \quad (3-8-1a)$$

$$e_{zz} = \frac{-2C_{12}}{C_{11}} e_{\parallel} \quad (3-8-1b)$$

$$e_{xy} = e_{yz} = e_{zx} = 0 \quad (3-8-1c)$$

$$e_{\parallel} = \frac{a_A - a_B}{a_B} \quad (3-8-1d)$$

$$e_{\perp} = \frac{-e_{\parallel}}{\nu} \quad (3-8-1e)$$

$$\nu = \frac{C_{11}}{2C_{12}} \quad (3-8-1f)$$

元 C_{11} ,

- 10)

三个独
关系为:

- 11a)

- 11b)

- 11c)

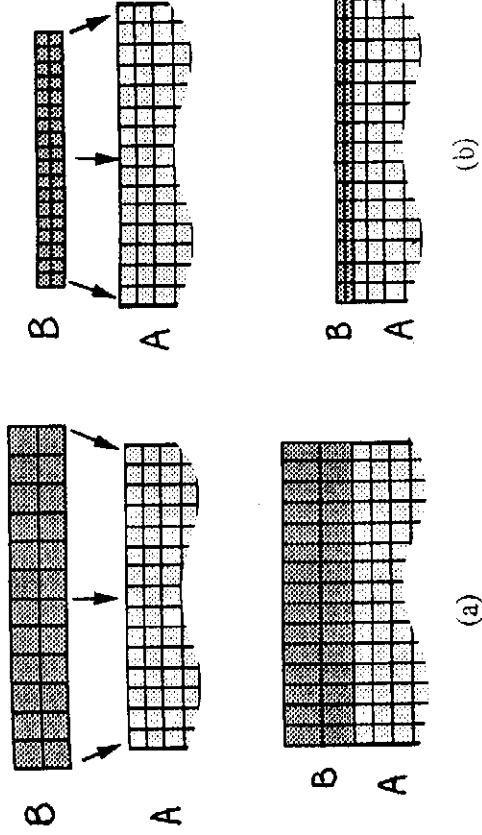


图 3.8.1 外延层共格生长在衬底上

其中 ν 是泊松比, $e_{\parallel}$ 是生长平面内的应变, $e_{\perp}$ 是生长方向上的应变, e_{xx} 、 e_{yy} 、 e_{zz} 、 e_{xy} 、 e_{yz} 、 e_{zx} 为平面双轴应变张量的张量元。

§ 3.9 均匀应变对半导体材料能带结构的影响

3.9.1 概述

将均匀应变引入半导体材料中, 不但会使半导体材料的晶格常数发生变化, 而且在某些情况下还会改变材料晶体结构的对称性。晶格常数和对称性的改变

于晶格
轴应变

其晶格

会使电子的能带结构和声子振动模发生很大的变化。晶体中的均匀应变,可以看作为两部分组成,一部分是液压应变分量,它只使晶体的体积发生变化而不改变晶体的对称性;另一部分是单轴应变分量,该分量通常使晶体的对称性降低(相对于零应变情况)。对电子态而言,带隙发生变化,而且在某些情况下,简并也会消除。由于带间跃迁矩阵元和带隙的变化,有效质量也会发生变化。电子能级随应变的变化可用形变势来描述,所谓形变势,即单位应变所引起的能级移动,形变势的大小一般在 1 到 10eV 之间。对晶体中的振动状态而言,声子频率也会发生变化,在本节中,我们将不涉及均匀应变对声子振动模的影响。

为了完全描述应变异质结构中的电子能级,需要知道应变对组成异质结构的体材料的特性的影响。这些影响包括:①应变导致的带隙的变化;②单轴应变使对称性降低而引起的能级分裂(简并消除);③应变引起的有效质量的变化。对前二者,人们已经做了很多研究工作,相比之下,对③则研究得较少。

在本节中,我们将讨论平面双轴应变对基本能带边的影响。

3.9.2 零应变和单轴应变时的能带结构

考虑晶体结构为闪锌矿结构的直接带隙半导体材料。零应变时,在 $k=0$ 处,价带边是一个 6 重简并的多重态。考虑到自旋—轨道相互作用,六重简并态分裂成一个四重简并态($|\frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$) 和一个二重简并态($|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$),如图 3.9.1(a) 所示。由于在 $k=0$ 处,总角动量 $J=\frac{3}{2}$ 的态是四重简并

态,因此,价带等能面是如图 3.9.1(a) 所示的扭曲面^[22]。价带 V_1 (重空穴带)和 V_2 (轻空穴带)的色散关系可以表示为:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \{Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2)^{1/2}]\} \quad (3-9-1)$$

正号相应于重空穴带,负号相应于轻空穴带, A, B, C 为常数, m_0 为自由电子质量。由方程 (3-9-1) 表示的扭曲等能面示于图 3.9.1(a) 中。自旋—轨道相互作用分裂带 V_3 的色散关系可以表示为:

$$E_3(\vec{k}) = -\Delta_0 - \frac{\hbar^2}{2m_0} A_\omega k^2 \quad (3-9-2)$$

其中 A_ω 为常数。

在单轴应变的作用下,轻、重空穴带在 Γ 点的简并将消除^[22-25]。在单轴压应变作用下,轻空穴带上升,重空穴带下降,三个价带 V_1 (轻空穴带)、 V_2 (重空穴

带)和 V_3 (导带分裂带)如图 3.9.1(b) 所示。三个价带之间的能量量记为 $E_g=1, 2, 3$ 。应变消除了简并,等能面,而是轴为旋转轴面^[22],如图 3.9.1(b) 所示。

3.9.3

下面
本能带边

3.9.3.1

导带

 H^c 其中 a_c

面双轴

带的影响

带相对

于零应变

3.9.3.2

根据

带) 和 V_3 (自旋—轨道分裂带) 如图 3.9.1(b) 所示。导带与三个价带之间的跃迁能量记为 $E_0(i)$, 其中 $i=1, 2, 3$ 。由于单轴应变消除了 $J = \frac{3}{2}$ 态的简并, 等能面不再是简并情况下的扭曲面, 而是以单轴应变轴为旋转轴的旋转椭球面^[22], 如图 3.9.1(b) 所示。

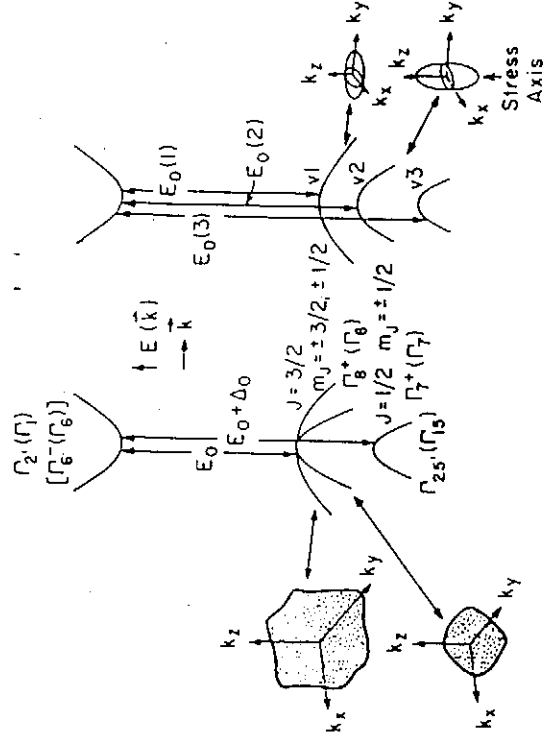


图 3.9.1 (a) 零应变时的能带图和等能面 (b) 单轴应变作用下的能带图和等能面

3.9.3 平面双轴应变对基本能带边的影响

下面我们讨论平面双轴应变对具有闪锌矿结构的直接带隙半导体材料的基态能带边, 即 $k=0$ 处的能级的影响。

3.9.3.1 平面双轴应变对导带极值的影响

导带的应变哈密顿量可以写为^[24]

$$H_c^{(2)} = a_c(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \quad (3-9-3)$$

其中 a_c 为导带形变势常数, e_{xx}, e_{yy}, e_{zz} 为应变张量元。把 (3-8-1) 式给出的平面双轴应变张量元代入 (3-9-3) 式, 即可求出 $H_c^{(2)}$ 。可见, 平面双轴应变对导带的影响只使导带整体发生移动, 如果是平面双轴压应变, 则 $H_c^{(2)} > 0$, 说明导带相对于零应变位置上升; 如果是平面双轴张应变, 则 $H_c^{(2)} < 0$, 说明导带相对于零应变位置下降。

3.9.3.2 平面双轴应变对价带极值的影响

根据有效质量理论^[26], 应变下的哈密顿量为:

$$H = H_0 + H_S \quad (3-9-4)$$

其中 H_0 为没有应变时的空穴哈密顿量^[26], H_s 是与应变有关的附加项:

$$H_S = D_d(e_{xx} + C.P.) + \frac{2}{3}D_u[(J_x^2 - \frac{1}{3}J^2)e_{xx} + C.P.] + \frac{2}{3}D'_u[\{J_x, J_y\}e_{xy} + C.P.] \quad (3-9-5)$$

其中 $C.P.$ 表示 x, y, z 循环, D_d, D_u, D'_u 为价带形变势参量, $\{J_x, J_y\}$ 由下式给出:

$$\{J_x, J_y\} = J_x J_y + J_y J_x \quad (3-9-5a)$$

除了上式,还有一种常用的 H_s 表示式^[27]:

$$H_s = -a_u(e_{xx} + C.P.) - 3b_u[(L_x^2 - \frac{1}{3}L^2)e_{xx} + C.P.] - \frac{6d_u}{\sqrt{3}}[\{L_x L_y\}e_{xy} + C.P.] \quad (3-9-6)$$

其中 a, b, d 是价带形变势参数。(3-9-5) 式与 (3-9-6) 式完全等价, 不同的是 (3-9-5) 式中是用总角动量算符 $\vec{J}$ 表示 H_s , 而 (3-9-6) 式中是用轨道角动量算符 $\vec{L}$ 表示 H_s 。形变势参量之间的关系为:

$$a_u = -D_d \quad (3-9-7a)$$

$$b_u = -\frac{2}{3}D_u \quad (3-9-7b)$$

$$\frac{2}{\sqrt{3}}d_u = -\frac{2}{3}D'_u \quad (3-9-7c)$$

把 (3-8-1) 式给出的平面双轴应变张量元代入 (3-9-5) 式, 可得与平面双轴应变相应的哈密顿量:

$$H_s = -a_u(e_{xx} + C.P.) - b_u[(J_x^2 - \frac{1}{3}J^2)]e_{xx} + C.P.] \quad (3-9-8)$$

可见, 对平面双轴张应变, 应变哈密顿量 H_s 比较简单。

以价带顶波函数为基矢组成表象, 该表象的六个基矢^[28] 如下:

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\uparrow$$

$$|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iY)\downarrow$$

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}[(X + iY)\downarrow - 2Z\uparrow]$$

$$|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$(3-9-9)$$

矩阵元为:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3}\Delta & & \\ & 0 & \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

对 |

旋—轨道
- 9 - 8)

δE_H

$\epsilon =$

容易

$0, \epsilon < 0.$

的能量变

求解

价带极值

E_{hh}

E_{th}

E_{so}

9-4)

$$|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{-1}{\sqrt{6}}[(X - iY)\uparrow + 2Z\downarrow] \quad (3-9-9)$$

9-5)

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY) + Z\uparrow]$$

9-6)

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}[(X - iY)\uparrow - Z\downarrow]$$

下式给

(3-9-8) 式所表示的平面双轴应变哈密顿量在各价带顶波函数之间的

矩阵元为:

9-5a)

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \quad |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

9-6)

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3}\Delta_0 - \delta E_H + \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3}\Delta_0 - \delta E_H - \epsilon & -\sqrt{2}\epsilon \\ 0 & -\sqrt{2}\epsilon & -\frac{2}{3}\Delta_0 - \delta E_H \end{bmatrix}$$

全等价,

式中是

(3-9-10)

9-7a)

对 $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ 有同样的矩阵。其中 Δ_0 是自旋一轨道分裂能量, δE_H 是式(3-9-8)中第一项引起的能量位移, δE_1 是式(3-9-8)第二项引起的能量分裂, δE_H 和 δE_1 的表达式如下:

9-7b)

$$\delta E_H = -a_v(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) = a_v \cdot e_{xx} \cdot (2 - \frac{2C_{12}}{C_{11}}) \quad (3-9-11)$$

可得与

$$\epsilon = b_v(e_{xx} - e_{zz}) = b_v \cdot e_{xx}(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}}) \quad (3-9-12)$$

容易看出, 对平面双轴压应变, $\delta E_H > 0, \epsilon > 0$; 对平面双轴张应变, $\delta E_H < 0, \epsilon < 0$ 。 δE_H 相当于一流体静压力引起的能量移动, δE_1 相当于一单轴应力引起的能量变化。

9-8)

求解与矩阵(3-9-10)相应的久期方程, 可得在平面双轴应变作用下, 各价带极值的能量位置(能量零点在零应变时重空穴价带顶之下 $\frac{1}{3}\Delta_0$ 处):

$$E_{\text{hh}} = \frac{1}{3}\Delta_0 - \delta E_H + \epsilon \quad (3-9-13)$$

$$E_{\text{h}} = -\delta E_H - \frac{1}{6}\Delta_0 - \frac{1}{2}\epsilon + \frac{1}{2}[\Delta_0^2 - 2\epsilon\Delta_0 + 9\epsilon^2]^{1/2} \quad (3-9-14)$$

$$E_{\text{so}} = -\delta E_H - \frac{1}{6}\Delta_0 - \frac{1}{2}\epsilon - \frac{1}{2}[\Delta_0^2 - 2\epsilon\Delta_0 + 9\epsilon^2]^{1/2} \quad (3-9-15)$$

相对于零应变时各价带边的位置,在平面双轴应变作用下各价带边的位置变化为:

$$\Delta E_{v_h} = -\delta E_H + \epsilon \quad (3-9-16)$$

$$\Delta E_{v_n} = -\delta E_H - \frac{1}{2}(\Delta_0 + \epsilon) + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 - 2\Delta_0 \cdot \epsilon + 9\epsilon^2} \quad (3-9-17)$$

$$\Delta E_{v_o} = -\delta E_H + \frac{1}{2}(\Delta_0 - \epsilon) - \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 - 2\Delta_0 \cdot \epsilon + 9\epsilon^2} \quad (3-9-18)$$

从(3-9-10)可知,单轴应变使轻空穴带和自旋轨道分裂带发生混合,因而在(3-9-14)、(3-9-15)两式中出现了依赖于应变的非线性项,该非线性项为:

$$F(Y) = (1 - 2Y + 9Y^2)^{1/2} \quad (3-9-19a)$$

其中

$$Y = \frac{\epsilon}{\Delta_0} \quad (3-9-19b)$$

Y 表示单轴应变使轻、重空穴带简并消除的程度。当 $\Delta_0 \gg \epsilon$ 时,

$$F(Y) \approx 1 - Y \quad (3-9-19c)$$

把(3-19-19c)代入(3-9-17)、(3-9-18)得:

$$\Delta E_{v_h} \approx -\delta E_H - \epsilon \quad (3-9-20a)$$

$$\Delta E_{v_o} \approx \delta E_H \quad (3-9-20b)$$

此二式说明当不考虑自旋—轨道分裂带与轻空穴带的相互作用时,单轴应变分量对自旋—轨道分裂带没有影响,但使轻空穴带移动 ϵ ,使轻空穴带移动的方向与重空穴带移动的方向相反。

根据上面的讨论,我们可以得到以下结论:

- ① 平面双轴应变可以分解为液压应变和单轴应变两个分量;
- ② 液压应变使所有价带整体移动,移动量为 δE_H ;
- ③ 单轴应变分量使重空穴带和轻空穴带在 $k=0$ 处的简并消除,如不考虑轻空穴带和自旋—轨道分裂带之间的耦合,则在 $k=0$ 处,轻重空穴带的裂距为 $|2\epsilon|$;

- ④ 在单轴应变的作用下,轻空穴带与自旋轨道分裂带发生耦合。

下面,我们用本节得到的结论讨论平面双轴应变对共轭生长在(001) InP 衬底上的 $In_xGa_{1-x}As$ 材料的能带极值($k=0$ 处)的影响。

的位置

§ 3.10 平面双轴应变中的单轴应变分量对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 能带极值的影响 ($k=0$)

考虑共格生长在 $(001)\text{InP}$ 衬底上的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 单层材料, 当 $x=0.53$ 时, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 与 InP 衬底匹配, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 处于零应变状态; 当 $x>0.53$ 时, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 处于平面双轴压应变状态; 当 $x<0.53$ 时, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 处于平面双轴张应变状态。在平面双轴应变作用下, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的能带极值位置、禁带宽度等均会发生变化。平面双轴应变是 In 组份 x 的函数。因此, 下面我们求 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的能带极值及禁带宽度随 In 组份 x 的变化。

- 19a)

3.10.1 计算方法

用表 3.6.1 中给出的计算参数进行计算, 计算方法如下:

- 19b)

① 根据 Vegard 定律, 用线性内插方法, 由 InAs 和 GaAs 的晶格常数、弹性常数等求出 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的晶格常数、弹性常数等。

- 19c)

② 把求得的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的

- 20a)

有关参数代入 (3-8-1) 式, 求出 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的平面双轴应变张量元 e_{xx} , e_{yy} 和 e_{zz} 。

- 20b)

③ 把求得的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的平面双轴应变张量元及 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的相关参数代入 (3-9-11) 和 (3-9-12) 求出 δE_H 和 ϵ 。

不考虑
裂距为

④ 把 δE_H , ϵ 及 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的有关参数代入 (3-9-16)、(3-9-17)、及 (3-9-18),

即可求得 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 在平面双轴应变作用下, 各价带极值的变化。

 InP 衬

3.10.2 计算结果

图 3.10.1 给出了重空穴带及轻空穴带极值 ($k=0$ 处) 在单轴应变作用下相

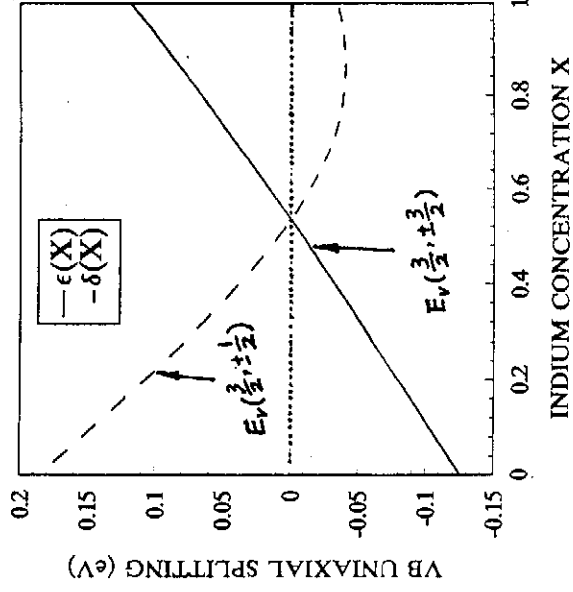


图 3.10.1 在平面双轴应变中的单轴应变分量作用下, 轻空穴带及重空穴带极值随 In 组份的变化

对于零应变时的移动。由图可以看出:①当 $x \neq 0.53$ 时,轻、重空穴带简并消除。②当 $x > 0.53$ 时,重空穴带在轻空穴带之上;当 $x < 0.53$ 时,轻空穴带在重空穴带之上。③平面双轴张应变中的单轴分量使轻空穴带相对于零应变时上升,使重空穴带相对于零应变时下降。④平面双轴压应变中的单轴分量使轻空穴带相对于零应变时下降,使重空穴带相对于零应变时上升。⑤当 $x > 0.53$ 时,轻空穴带与自旋轨道分裂带的相互作用非常强烈,这一相互作用使得轻空穴带的极值随 In 组份 x 的变化明显偏离线性关系。

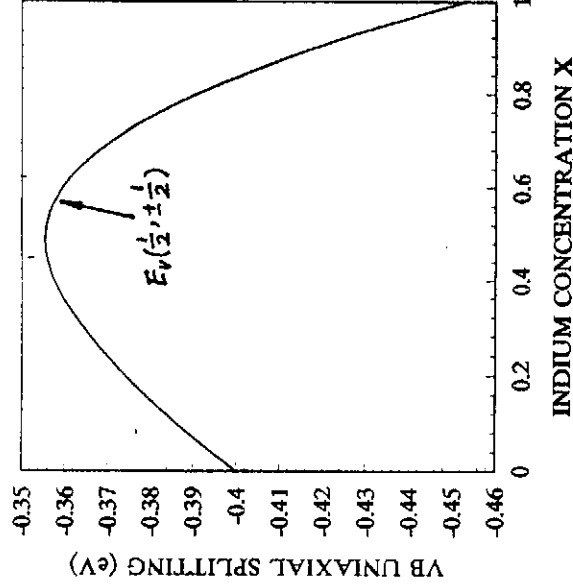


图 3.10.2 平面双轴应变中的单轴应变分量对自旋—轨道分裂带极值的影响

图 3.10.2 给出了自旋—轨道分裂带极值随 In 组份的变化。由图可以看出,在平面双轴应变中的单轴应变分量作用下,自旋—轨道分裂带的极值位置相对于零应变时的位置下降,这一结论对于 $x > 0.53$ 或 $x < 0.53$ 均是正确的。

§ 3.11 平面双轴应变对 $In_xGa_{1-x}As$ 带隙的影响

3.11.1 平面双轴应变中的液压应变分量对带隙的影响

平面双轴应变中的液压应变分量既影响导带边位置,也影响价导边位置,对导带边位置的影响可用式(3-9-3)求出,对价带边的影响可用(3-9-11)式求出。我们用带隙形变势 $a_g(x)$ 来求 $\Delta E_g(x)$ 。

液压应变分量对带隙的影响可以由下式计算:

$$\Delta E_g(x) = a_g(x)(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \quad (3-11-1)$$

其中 $a_g(x)$ 由下式给出:

$$a_g(x) = \frac{1}{3}[C_{11}(x) + 2C_{12}(x)]\left[-\frac{dE_g(x)}{dp}\right] \quad (3-11-2)$$

$$\frac{dE_g(x)}{dp} \text{ 是}$$

$$In_xGa_{1-x}As$$

为禁带宽

$$In_xGa_{1-x}As$$

11-1) 式

图 3.

的在平面

用下 In_xC

In 组份 x

相对于零

时,液压应

当 $x < 0$

宽度减小

是相对

$$In_xGa_{1-x}$$

$x > 0.5$

于平面

小。

3.11.2

考

$$In_xGa_{1-x}$$

$$H$$

$$L$$

其中 ϵ

$$\delta =$$

δ 是自旋

分裂带

式,即

图

$\frac{dE_g(x)}{dp}$ 是单位液压作用下

$In_xGa_{1-x}As$ 禁带宽度的变化, 称为禁带宽度的液压系数。把 $In_xGa_{1-x}As$ 的相关参数代入 (3-11-1) 式, 即可求出 $\Delta E_g(x)$ 。

图 3.11.1 给出了计算得到的在平面双轴应变的液压分量作用下 $In_xGa_{1-x}As$ 的禁带宽度随 In 组份 x 的变化。由图可以看出, 相对于零应变: ① 当 $x > 0.53$ 时, 液压应变使禁带宽度增大; ② 当 $x < 0.53$ 时, 液压应变使禁带宽度减小。注意, 此处的 $\Delta E_g(x)$ 是相对于处于零应变状态的

$In_xGa_{1-x}As$ 的禁带宽度而言的。对共格生长在 (001) InP 衬底上的 $In_xGa_{1-x}As$, 当 $x > 0.53$ 时, $In_xGa_{1-x}As$ 处于平面双轴压缩状态; 当 $x < 0.53$ 时, $In_xGa_{1-x}As$ 处于平面双轴伸张状态。因此, 液压压缩使禁带宽度增大, 液压伸张使禁带宽度减小。

3.11.2 平面双轴应变对 $In_xGa_{1-x}As$ 带隙的影响

考虑到平面双轴应变中的液压分量和单轴应变分量的影响, 容易得到与 $In_xGa_{1-x}As$ 的重空穴及轻空穴带相对应的带隙 $H(x)$ 和 $L(x)$:

$$H(x) = E_g^f(x) + \Delta E_g(x) - \epsilon \quad (3-11-3)$$

$$L(x) = E_g^f(x) + \Delta E_g(x) + \epsilon - \delta \quad (3-11-4)$$

其中 ϵ 的定义与 (3-9-12) 式中的 ϵ 定义相同, δ 由下式给出:

$$\delta = \frac{1}{2}[\epsilon - \Delta_0] + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta_0^2 - 2\Delta_0\epsilon + 9\epsilon^2} \quad (3-11-5)$$

δ 是自旋—轨道分裂带与轻空穴带相互作用所引起的轻空穴带和自旋—轨道分裂带的移动 [参看式 (3-9-17) 及 (3-9-18)]。把有关的参量代入以上三式, 即可求得禁带宽度随 In 组份 x 的变化。

图 3.11.2 中给出了计算得到的禁带宽度随 In 组份而变化的关系曲线, 图中

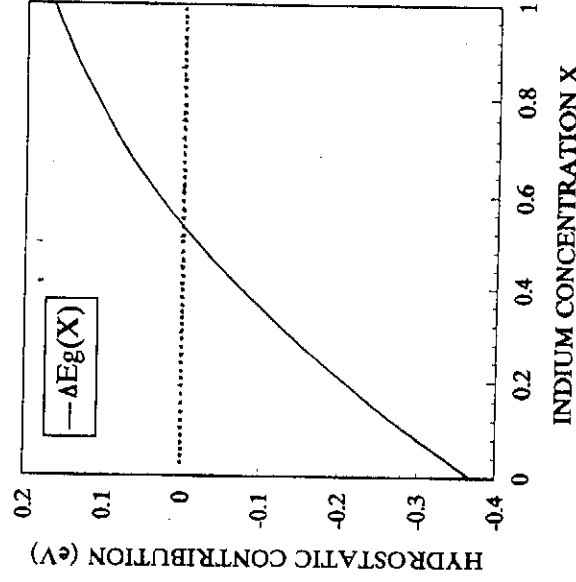


图 3.11.1 平面双轴应变中的液压应变分量引起的 Γ 点带隙的变化

量对自

以看出,
置相对
的。

位置, 对
(-11)

1-1)

1-2)

$E_g(x)$ 表示自由状态时与重空穴带相应的带隙, $L(x) - LHSO$ 表示考虑到单轴应变分量所引起的轻空穴带与自旋—轨道分裂带耦合时的轻空穴带隙, $L(x) - LH$ 表示不考虑 LH 与 SO 耦合时的轻空穴带隙, $H(x)$ 表示重空穴带隙。

由图可见:①与自由状态相比,当 $x > 0.53$ 时,重空穴带隙增大;当 $x < 0.53$ 时,重空穴带隙减小。②与匹配状态相比(即与 $x = 0.53$ 时的情况相比), $x > 0.53$ 时,带隙减小; $x < 0.53$ 时,带隙增大。③当 $x = 0.53$ 时,轻、重空穴带简并;当 $x > 0.53$ 时,重空穴带隙小于轻空穴带隙;当 $x < 0.53$ 时,轻空穴带隙小于重空穴带隙。④平面双轴应变的存在使得带隙随组份的变化比自由状态时带隙随组份的变化更加缓慢。

§ 3.12 平面双轴应变对 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 异质结构能带排列的影响

对共格生长在 (001) InP 衬底上的 $In_xGa_{1-x}As$ 材料,当 In 组份 x 变化时, $In_xGa_{1-x}As$ 的禁带宽度就会发生变化, $In_xGa_{1-x}As$ 的禁带宽度的变化来自两方面的原因:① In 组份的变化引起处于自由状态的 $In_xGa_{1-x}As$ 禁带宽度的变化;② In 组份 x 的变化引起 $In_xGa_{1-x}As$ 的应变状态发生变化,而应变状态的变化又会引起 $In_xGa_{1-x}As$ 带隙的变化。 $In_xGa_{1-x}As$ 带隙的变化会使 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 异质结构材料系统的能带排列发生变化。因此,我们考虑 $In_xGa_{1-x}As/InP$ 异质结构材料系统的能带排列时,必须考虑到以上两种因素引起的 $In_xGa_{1-x}As$ 的带隙变化对导带和价带不连续参数的影响。

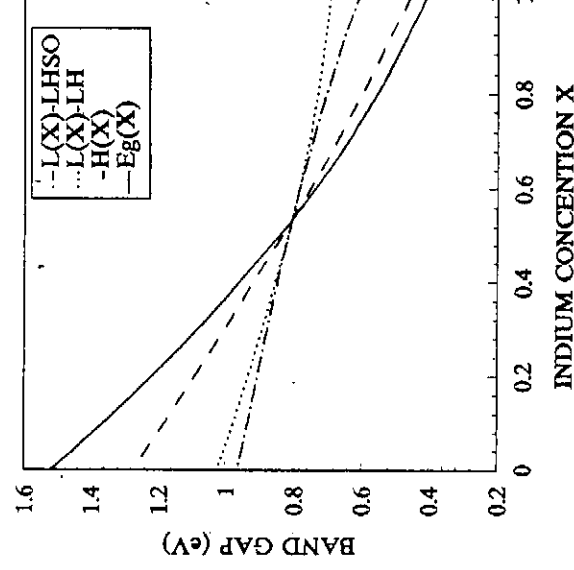


图 3.11.2 平面双轴应变对 $In_xGa_{1-x}As$ 带隙的影响

3.12.1

考虑

表 3.6.1 可

由状态时的

$E_g^f(x)$

因此, In_xG

由表 3.6.

$GaAs/InP$

理由假定

参数 V_p^f 可

$V_p^f =$

从而导带

$V_p^f =$

3.12.2

当 In

然要受到

作用。因

双轴应变

异质结

响。

图 3

定的 In

缩应变

异质结

响。在图

$In_xGa_{1-x}A$

时 In_xG

构的能

3.12.1 零应变时 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构的能带排列

考虑 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 处于自由状态时, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构的能带排列。由表 3.6.1 可知, 10K 时 InP 的带隙 $E_g(\text{InP}) = 1.424\text{eV}$, 另外, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 处于自由状态时的带隙:

$$E_g^f(x) = 1.5192 - 1.5837x + 0.475x^2 \quad (3-12-1)$$

因此, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 与 InP 的禁带宽度之差, 可用下式求得:

$$\Delta E_g^f(x) = E_g(\text{InP}) - E_g^f(x) \quad (3-12-2)$$

由表 3.6.1 可知, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 的价带不连续参数 0.37eV 正好可由 GaAs/InP 和 InAs/InP 的价带不连续性参数通过线性内插而求得, 因此, 我们有理由假定 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 处于自由状态时, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构的价带不连续性参数 V_p^f 可经线性内插求得, 因此有

$$V_p^f = 0.34(1-x) + 0.41x \quad (3-12-3)$$

从而导带不连续参数为:

$$V_c^f = \Delta E_g^f(x) - V_p^f(x) \quad (3-12-4)$$

As 带隙
轻空穴
自由状

3.12.2 平面双轴应变作用下 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 异质结构的能带排列

当 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 共格生长在 (001)InP 衬底上时, 如 $x \neq 0.53$ 时, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 必然要受到平面双轴应变的作用。因此, 必须考虑平面双轴应变对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构能带排列的影响。

图 3.12.1 给出了对给定的 In 组分 x , 平面双轴压缩应变对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构能带排列的影响。在图中, 分别给出了 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 处于自由状态时 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构的能带排列、平面双轴

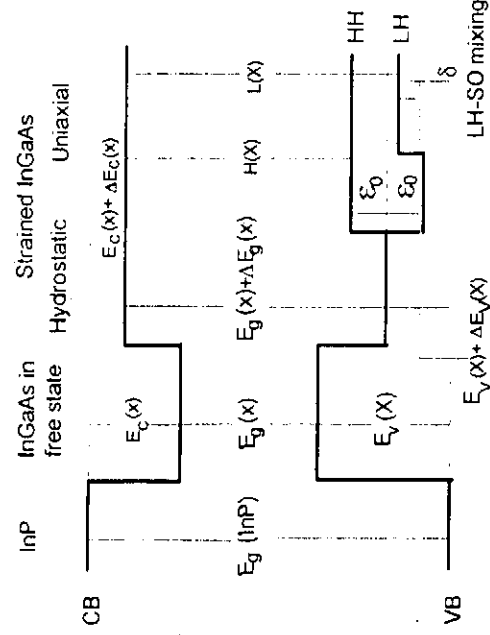


图 3.12.1 平面双轴应变对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构能带排列的影响示意图

应变中的液压力分量对能带排列的影响、平面双轴应变中的单轴应变分量对能带排列的影响以及轻空穴带与自旋—轨道耦合分裂带相互作用对轻空穴价带能带排列的影响。应用表 3.10.1 中给出的参数及前面讨论过的平面双轴应变对能带极值的影响的计算公式,根据图 3.12.1 即可计算出不同 In 组份 x 时 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构的能带排列。

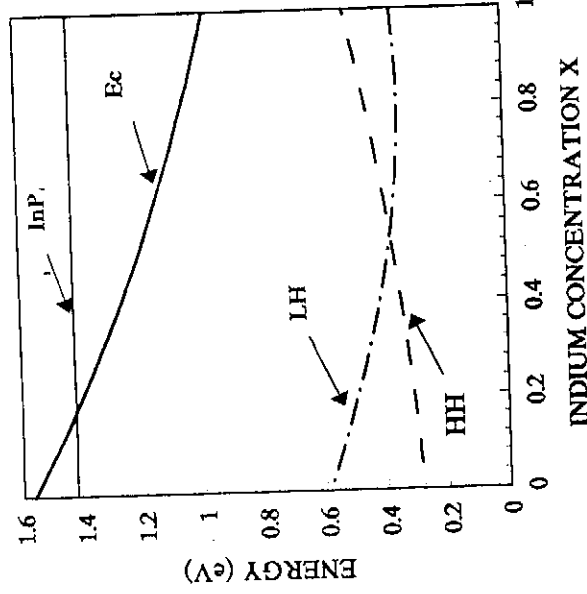


图 3.12.2 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构能带排列随 In 组份的变化

图 3.12.2 给出了计算结果,其中能量零点选在 InP 的价带顶。由图可见:① 导带不连续参数及价带不连续参数均随 In 组份而变。② 在 $x = 0.18$ 处,异质结构的能带排列发生从 I 型向 II 型的转变,当 $x < 0.18$ 时,能带排列为 I 型;当 $x > 0.18$ 时,能带排列为 II 型。③ In 组份的变化对重空穴带的价带不连续参数影响较大,而对轻空穴带的价带不连续参数影响较小;④ 当 $x > 0.18$ 时,随着 In 组份的增大,导带及重空穴价带的不连续参数均增大。

由于共格生长在 (001) InP 衬底上的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构的能带排列随 In 组份而变,因此,我们在计算 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ 应变量子阱中的激子跃迁能量时,必须使用相应 In 组份下的导带及价带不连续参数。

§ 3.13 平面双轴应变对有效质量的影响

我们在前面讨论了平面双轴应变对 $k = 0$ 处的能带极值的影响,在本节,我们将讨论平面双轴应变对有效质量的影响,这就需要知道在平面双轴应变作用下 $k = 0$ 附近的能带结构,我们用 $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 微扰论求 $k = 0$ 附近的能带结构。

$\vec{k} \cdot \vec{p}$ 微扰论中的价带哈密顿算符 $H(\vec{k})$ 由 Luttinger 给出^[17, 25, 29]:

$$H_{VB}(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \{ \gamma_1 k^2 - 2\gamma_2 \left[\left(J_z^2 - \frac{1}{3} J^2 \right) k_x^2 + C.P. \right] - 4\gamma_3 \{ J_x, J_y \} \{ k_x, k_y \} + C.P. \} \quad (3-13-1)$$

$H_{VB}(\vec{k})$ 称为价带的 Luttinger 哈密顿量, 其中 m_0 为自由电子质量, $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, $\gamma_i (i=1 \sim 3)$ 是 Luttinger 参数, $\{k_x, k_y\} = k_x k_y + k_y k_x$, C. P. 表示对指标 x, y, z 进行循环操作。

考虑到自旋—轨道相互作用及平面双轴应变中的单轴应变的作用, 价带哈密顿量可以写为^[17]:

$$H_V = H_{VB}^0 + H_{VB}(\vec{k}) + H_{SO} \quad (3-13-2)$$

其中 H_{SO} 是自旋—轨道相互作用哈密顿量, H_{VB}^0 是单轴应变哈密顿量。

价带密顿量的 6×6 矩阵可以写为^[30]:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) & \left(\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right) & \left(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) & \left(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right) & \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ H & \alpha & \beta & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\alpha & -i\sqrt{2}\beta \\ \alpha^* & L & 0 & \beta & i\left(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\epsilon\right) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\alpha \\ \beta^* & 0 & L & -\alpha & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\alpha^* & i\left(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\epsilon\right) \\ 0 & \beta^* & -\alpha^* & H & -i\sqrt{2}\beta^* & \frac{-i}{\sqrt{2}}\alpha^* \\ \frac{-i}{\sqrt{2}}\alpha^* & -i\left(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\epsilon\right) & i\sqrt{\frac{3}{2}}\alpha & i\sqrt{2}\beta & S & 0 \\ i\sqrt{2}\beta^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}\alpha^* & -i\left(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\epsilon\right) & \frac{i}{\sqrt{2}}\alpha & 0 & S \end{bmatrix} \quad (3-13-3)$$

其中 ϵ 的意义同前, 即在单轴应变作用下, $k=0$ 处重空穴价带顶的移动量, 其它各量的表达式如下:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(k_x^2 + k_y^2)(\gamma_1 + \gamma_2) + k_z^2(\gamma_1 - 2\gamma_2)] + \epsilon \equiv H_{hh} + \epsilon, \quad (3-13-4a)$$

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m_0} [(k_x^2 + k_y^2)(\gamma_1 - \gamma_2) + k_z^2(\gamma_1 + 2\gamma_2)] \equiv H_{lh} - \epsilon, \quad (3-13-4b)$$

$$\alpha = i \frac{\sqrt{3}}{m_0} \hbar^2 [k_x(k_x - ik_y)\gamma_3], \quad (3-13-4c)$$

$$\beta = -\frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\hbar^2}{m_0} [(k_x^2 - k_y^2)\gamma_2 - 2ik_x k_y \gamma_3], \quad (3-13-4d)$$

$$D = (H_{\text{ia}} - H_{\text{ba}}), \quad (3-13-4e)$$

$$S = \frac{1}{2}(L + H) - \Delta_0 \quad (3-13-4f)$$

其中 $H_{\text{ba}}, H_{\text{ia}}, \{(H_{\text{ba}} + H_{\text{ia}})/2 - \Delta_0\}$ 是无应变时 $H_{\text{VB}}(\vec{k})$ 矩阵的对角元素, 这些对角元素给出了无应变时重空穴带、轻空穴带及自旋—轨道分裂带的色散关系(至 k^2)。值得注意的是, 轻重空穴带在 z 方向上的有效质量不同于它们在 xy 平面内的有效质量, 即轻、重空穴带的色散关系是各向异性的。

与矩阵(3-13-3)相应的久期方程是双重简并的, 由(3-13-3)求得的本征值方程是能量 E 的三次方程:

$$\begin{aligned} & \left\{ -\mathfrak{S} \mathcal{H} \mathcal{I} + \mathcal{H} \left(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\epsilon \right)^2 + |\alpha|^2 \left(\frac{3}{2} \mathcal{H} + \frac{1}{2} \mathcal{I} + \mathfrak{S} - D + 2\epsilon \right) \right. \\ & \quad \left. + |\beta|^2 (2\mathcal{I} + \mathfrak{S} + 2D - 4\epsilon) + 3\sqrt{3} \text{Re}[(\alpha)^2 \beta^*] \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3-13-5)$$

其中 $\mathcal{H} = H - E, \mathcal{I}, \mathfrak{S}$ 的定义与 $\mathcal{H}$ 相同, E 是能量本征值。

3.13.1 抛物带近似

在方程(3-13-5)中, α 和 β 以模方的形式出现在方程中, 因此, 它们对色散关系的影响是使色散关系中出现 k^4 或比 k^4 更高次的项, 换言之, 它们只与能带的非抛物性有关。如果只希望色散关系中出现与 k^2 相关的项, 即在抛物带近似下, 可令 $\alpha = \beta = 0$, 由此可得:

$$\mathcal{H} \left\{ -\mathfrak{S} \mathcal{I} + \left(\frac{D}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\epsilon \right)^2 \right\} = 0 \quad (3-13-6)$$

可见, 在抛物带近似下, 重空穴带与轻空穴带和自旋—轨道分裂带解耦, 但是, 平面双轴应变中的单轴应变分量却使轻空穴带和自旋—轨道分裂带相互耦合。由(3-13-6)可得三个二重简并的本征值为(注意, 对(001)方向上的单轴应变, M_J 仍是一个好量子数):

$$E_V \left(\frac{3}{2}, \pm \frac{3}{2} \right) = H_{\text{ba}} + \epsilon \quad (3-13-7a) \quad \textcircled{1}$$

$$E_{\frac{1}{2}}(\pm) = -\frac{\Delta_0}{2}(1+Y) + \frac{1}{4}(3H_h + H_{hh}) \\ \pm \frac{\Delta_0}{2}[1-2Y+9Y^2]^{1/2} \left\{ 1 + \left(\frac{D}{\Delta_0}\right) \frac{(1-9Y)}{[1-2Y+9Y^2]} \right. \\ \left. + \frac{9}{4} \left[\frac{D}{\Delta_0}\right]^2 \frac{1}{[1-2Y+9Y^2]} \right\}^{1/2} \quad (3-13-7b)$$

其中

$$Y = \frac{\epsilon}{\Delta_0} \quad (3-13-7c)$$

+ 和 - 分别与零应变时的轻空穴带 ($\frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$) 和自旋—轨道分裂带 ($\frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}$) 相对应。

如果自旋—轨道分裂能量 Δ_0 大于轻重空穴带裂距, 即

$\Delta_0 > (H_{hh} - H_h)$, 则由 (3-13-7b) 可得:

$$E_{\frac{1}{2}}(+) = E_{v^{(+)}(0)} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} (\gamma_1 - Z\gamma_2) - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2Z\gamma_2), \quad (3-13-8a)$$

$$E_{\frac{1}{2}}(-) = E_{v^{(-)}(0)} - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_0} [\gamma_1 - \gamma_2(1-Z)] - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} [(1-Z)\gamma_1 - 2\gamma_2], \quad (3-13-8b)$$

其中函数 $Z(Y)$ 由下式给出:

$$Z(Y) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1-9Y}{(1-2Y+9Y^2)^{1/2}} \right], \quad (3-13-8c)$$

$E_{v^{(+)}}(0)$ 、 $E_{v^{(-)}}(0)$ 由下式给出:

$$E_{v^{(+)}}(0) = -\frac{1}{2}(\epsilon + \Delta_0) + \frac{1}{2}[9\epsilon^2 + \Delta_0^2 - 2\epsilon\Delta_0]^{1/2} \quad (3-13-8d)$$

$$E_{v^{(-)}}(0) = -\frac{1}{2}(\epsilon + \Delta_0) - \frac{1}{2}[9\epsilon^2 + \Delta_0^2 - 2\epsilon\Delta_0]^{1/2} \quad (3-13-8e)$$

$E_{v^{(+)}}(0)$ 和 $E_{v^{(-)}}(0)$ 为有单轴应变作用时, 轻空穴带边及自旋—轨道相互作用带边的能量, 能量零点选在零应变时的重空穴的价带顶。

图 3.13.1 给出了 $Z(Y)$ 随 Y 变化的曲线。当 $Y \rightarrow -\infty, Z(Y) \rightarrow 2$; 当 $Y \rightarrow +\infty, Z(Y) \rightarrow -1$ 。由 (3-13-8) 式可见, 价带的有效质量与 $Z(Y)$ 密切相关, 而 $Z(Y)$ 的大小和正负号由平面双轴应变中的单轴应变分量决定。因此, 失配结构的共格生长所引入的平面双轴应变对轻重空穴带及自旋—轨道分裂带的有效质量有很大的影响。

综上所述, 在 $\Delta_0 > (H_{hh} - H_h)$ 以及抛物带近似下:

① 重空穴带在 xy 平面内的有效质量

$$m_{hh}^* = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2}$$

$$(3-13-9a)$$

在 z 方向上的有效质量

$$m_{hh}^*(z) = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$$

$$(3-13-9b)$$

② 轻空穴带在 xy 平面内的有效质量

$$m_{lh}^*(z) = \frac{m_0}{\gamma_1 - Z\gamma_2}$$

$$(3-13-10a)$$

在 z 方向上的有效质量

$$m_{lh}^*(Z) = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2Z\gamma_2}$$

$$(3-13-10b)$$

③ 自旋—轨道分裂带在 xy 平面内的有效质量

$$m_{so}^*(z) = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2(1-Z)}$$

$$(3-13-11a)$$

在 z 方向上的有效质量为

$$m_{so}^*(z) = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2(1-Z)}$$

$$(3-13-11b)$$

④ 在平面双轴应变中的单轴应变作用下, 在 xy 平面内, 轻、重空穴带的有效质量发生倒转效应, 即重空穴有效质量小于轻空穴有效质量。

3.13.2 能带的非抛物性

考虑到能带的非抛物性, 色散关系可以写为:

$$E_j = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_j^*(0)} [1 - \gamma_{NP} k^2]$$

$$(3-13-12)$$

其中 $m_j^*(0)$ 是第 j 个能带的带边的有效质量, γ_{NP} 是第 j 个带的非抛物性因子。

3.13.2.1 当 $\vec{k} = (0, 0, k_z)$ 时

α, β 均等于零, 从 (3-13-5) 式仍然得到 (3-13-6) 式。由于重空穴带解耦, 因此, 重空穴带在 k_z 方向上严格保持抛物带关系。但是, 轻空穴带与自旋—轨道分裂带由于单轴应变的作用而发生混合。忽略 k^4 以上的项, 并将方程 (3-13-7b) 中的根式展开, 我们可以得到轻空穴带及自旋—轨道耦合分裂带沿

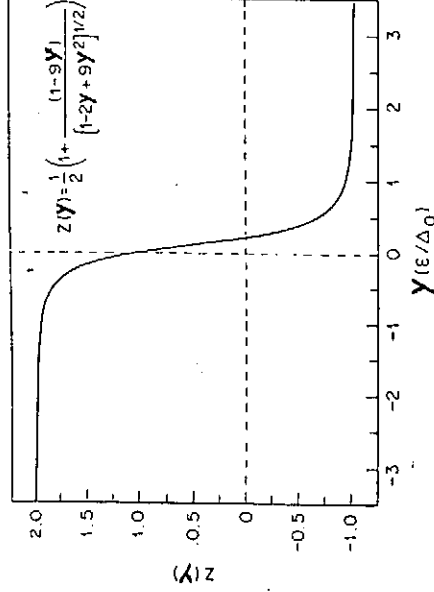


图 3.13.1 $Z(Y)$ 与 Y 之间的关系曲线

k_z 方向上

$\gamma_1(\pm$

其中 $Z'(0)$
量。考虑到

m_j^*

其中

E_{NP}

3.13.2.1

使

非抛物性

分裂带在

Δ_0 相比

γ_{NP}

其中

m_{hh}

可见, 在

裂距 ($\sim$

在 xy 平

§ 3.14

我

能量。对

宽度 E_{hh}

对激子

阱中的

对

k_z 方向上的非抛物性因子:

$$\gamma_{\frac{1}{2}}(\pm) = \pm \frac{\hbar^2}{2m_0\Delta_0} \left\{ \left[\gamma_1 + (1 \pm Z')\gamma_2 \right] [1 - 2Y + 9Y^2]^{3/2} \right\} \quad (3-13-13)$$

其中 $Z'(Y) \equiv 2Z(Y) - 1$, $Z(Y)$ 的表达式即(3-13-8c)式, m_0 是自由电子质量. 考虑到非抛物性修正, 有效质量为:

$$m_j^*(E) = m_j^*(0) / [1 - |E|/E_{NP}] \quad (3-13-14a)$$

其中

$$E_{NP} = [2m_j^*(0) \cdot \gamma_{NP}^2] / \hbar^2 \quad (3-13-14b)$$

3.13.2.2 当 $\vec{k} = (k_x, k_y, 0)$ 时

使方程(3-13-5)中的 $kz = 0$ (因此 $\alpha = 0$), 即可求出此种情况下能带的非抛物性对有效质量的修正. 一般而言, 重空穴带、轻空穴带及自旋—轨道耦合分裂带在 $kxky$ 平面内是互相耦合的. 如果与应变能量 ϵ 和自旋—轨道分裂能量 Δ_0 相比, 能量 E 较小, 则可求出在 $kxky$ 平面内重空穴带的非抛物性因子:

$$\gamma_{NP}(\pm \frac{3}{2}) = \frac{3}{2} \left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \right)^2 \frac{(1 + 9Y)}{\epsilon} \frac{\hbar^2}{2m_{hh}^*(0)} \quad (3-13-15a)$$

其中

$$m_{hh}^*(0) = m_0 / (\gamma_1 + \gamma_2) \quad (3-13-15b)$$

可见, 在 xy 平面内, 重空穴带的非抛物性因子反比于单轴应变导致的轻重空穴带裂距 ($\sim 2\epsilon$). 上面的讨论表明, 尽管重空穴带在 z 方向上严格保持抛物性, 但它在 xy 平面内却具有非抛物性能带。

§ 3.14 In₂Ga_{1-x}As/InP 应变量子阱中激子跃迁能量的理论计算

3-12)

性因子。

我们在本章 § 3.6 节中计算了 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 匹配量子阱中的激子跃迁能量. 对匹配量子阱: ① 由于 In 组份 x 是固定不变的, 因此, 我们不必考虑禁带宽度 E_g 随 In 组份的变化; ② 由于晶格是匹配的, 因此, 我们不必考虑内建应变对激子跃迁能量的影响. 我们只需考虑量子尺寸效应和非抛物带效应以及量子阱中的激子束缚能, 即可得到 In_{0.53}Ga_{0.47}As/InP 匹配量子阱中的激子跃迁能量.

对应变量子阱, 情况有所不同. 为了确定共格生长的 In₂Ga_{1-x}As/InP 应变