

InGaAs/InP 应变量子阱的能带比较 *

刘宝林 黄美纯

(厦门大学物理学系 厦门 361005)

摘 要

利用 $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 方法计算了 InGaAs/InP 的 10.0 nm 阱宽应变量子阱在 1% 压缩应变、无应变和 1% 伸张应变三种情况下的能带结构及其态密度。结果表明在阱宽较宽时, 伸张应变在开始很大能量之内子带较少, 在一段能量范围之内, 具有比无应变时小的态密度, 因此从能带角度考虑, 在伸张应变时, 利用增大阱宽将可以改善器件性能。

关键词 $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 方法, InGaAs/InP, 量子阱, 能带

1 引 言

1986 年, Adams^[1] 和 Yablonovitch 及 Kane^[2] 独立指出了利用压缩应变可以实现最高空穴带有为类轻空穴子带, 并且可以使 Auger 复合和价带间吸收 (IVBA) 减小几个数量级, 从理论上指出了压缩应变是提高激光器性能的有效手段。从此开始了半导体器件特别是 III-V 族半导体激光器由原来的杂质工程向能带工程的转变。从 1986 年以后, 人们利用紧束缚法^[3] 和 $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 法^[4] 对压缩应变量子阱进行了很多的理论研究。80 年代后期理论和实验工作主要是研究压缩应变对半导体能带和激光器性能的影响。但 1990 年以后人们从实验上发现利用伸张应变同样可以使器件性能改善。对此, O'Reilly^[5] 等指出了伸张应变使轻空穴态为最高空穴子带, TM 模具有较大的增益矩阵元的理论, 并对类似体材料 (不考虑量子效应, 只考虑应变效应) 计算了增益谱, 发现它确实可以减小阈值电流。

2 III-V 族化合物的能带 $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 理论

研究体材料的能带结构的方法很多, 主要有^[6]1) 紧束缚法; 2) 赝势法; 3) $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 微扰法; 4) 线性丸合轨道 (LMTO) 法等。 $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 微扰法在这四种方法中具有简单、直观等优点, 计算时它只需要很少的材料参数, 在半导体能带计算时被广泛使用。 $\vec{k} \cdot \vec{P}$ 法是用已知波矢空间 K_0 点的本征值和所有本征函数来求出其他 K 点的本征值和本征函数。根据单电子近似, 解周期场中电子运动的哈密顿方程发现 K_0 点可能具有无穷多个本征态, 计算能带时实际把 K_0 态分为两种: 一种态相互之间能量较近, 它们之间的相互作用较强, 用精确处理; 另一种较远, 作用较弱, 用微扰处理。 III-V 族化合物, 是以“ sp^3 杂化轨道”^[6] 形成四个共价键, 根据对称性分析, 在 Γ 点,

* 本文得到福建省自然科学基金和国家自然科学基金资助。

收稿日期: 1997-01-10

修改日期: 1997-04-18

Γ_6 (导带)由 s 态波函数导出, 而价带 $\Gamma_{15}(= \Gamma_7 + \Gamma_8)$ 由 p 态的组合导出。在 Γ 点导带和价带的波函数见表 1, 根据这些波函数和本征值, 就很容易求出任意一点的八个电子态哈密顿矩阵, 其他态对这八个态的作用当微扰处理, 可以根据实验结果得出。Luttinger 把这些作用, 用 γ_1 、 γ_2 、 γ_3 三个参数来表示^[7], 此时哈密顿算符可以简写为:

$$H_0 = \{1/2\gamma_1 k^2 - \gamma_2[(j_x^2 - j^2/3)k_x^2 + \text{C.P.}] - 2\gamma_3[\{J_x J_y\} \cdot k_x k_y + \text{C.P.}]\}. \quad (1)$$

J 为轨道角动量算符; $J_i(i = x, y, z)$ 为其分量; k_x, k_y, k_z 为波矢分量; C.P.(Cyclic Permutation)

表 1 Γ_6 、 Γ_8 、 Γ_7 点的波函数

	$ j, m_j\rangle$	波函数 Ψ	本征值 ($K = 0$)
Γ_6	$ 1/2, 1/2\rangle$	$is \uparrow$	E_c
	$ 1/2, -1/2\rangle$	$is \downarrow$	E_c
Γ_8	$ 3/2, 3/2\rangle$	$(1/2)^{1/2}(X + iY) \uparrow$	E_v
	$ 3/2, 1/2\rangle$	$-(2/3)^{1/2}Z \uparrow + (1/6)^{1/2}(X + iY) \downarrow$	E_v
	$ 3/2, -1/2\rangle$	$-(1/6)^{1/2}(X - iY) \uparrow - (2/3)^{1/2}Z \downarrow$	E_v
	$ 3/2, -3/2\rangle$	$(1/2)^{1/2}(X - iY) \downarrow$	E_v
Γ_7	$ 1/2, 1/2\rangle$	$(1/3)^{1/2}(X + iY) \downarrow + (1/3)^{1/2}Z \uparrow$	$E_v - \Delta$
	$ 1/2, -1/2\rangle$	$-(1/3)^{1/2}Z \downarrow + (1/3)^{1/2}(X - iY) \uparrow$	$E_v - \Delta$

表示循环置换操作。不考虑导带, 并考虑到二个自旋相反的粒子是简并时, 根据 Γ_6 、 Γ_8 、 Γ_7 点的波函数, 取 Γ_7 点能量为零点, 重、轻空穴四态哈密顿矩阵可写成^[8]:

$$H_0^\pm = \begin{bmatrix} P \pm Q & R \\ R^* & P \mp Q \end{bmatrix}.$$

$$P = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (-k_z^2 - k_{\parallel}^2).$$

$$Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (2k_z^2 - k_{\parallel}^2). \quad (2)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{m_0} (\sqrt{3}/2) [(\gamma_2^2 \cdot \cos^2(2\theta)) + \gamma_3^2 \sin^2(2\theta)]^{1/2} \cdot k_{\parallel}^2 + i\sqrt{3}\gamma_3 k_{\parallel} k_z.$$

$$K_{\parallel} = K_x^2 + K_y^2.$$

θ 为 k_{\parallel} 与 X 轴 (100) 方向的夹角。根据 (2) 式很容易导出 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 与 (100) 和 (111) 方向的重、轻空穴的有效质量的关系:

$$\frac{m_0}{m_{hh}^*(111)} = \gamma_1 - 2\gamma_3,$$

$$\frac{m_0}{m_{hh}^*(100)} = \gamma_1 - 2\gamma_2, \quad (3)$$

$$\frac{m_0}{m_{lh}^*(100)} = \gamma_1 + 2\gamma_2.$$

因此, 知道 (111) 和 (100) 二个方向的材料空穴有效质量就可以求出任意 K 点的重轻空穴能带。从 (2) 式很明显看出: (1) 当 $k_{\parallel} = 0$ 时重、轻空穴之间没有耦合 ($R = 0$); (2) $k_z \neq 0$ 时在

k_z 方向, $|3/2, \pm 3/2\rangle$ 态具有较重的有效质量, $|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态具有较轻的有效质量; (3) 当 $k_z \neq 0$ 时, 在 k_{\parallel} 方向, $|3/2, \pm 3/2\rangle$ 具有较轻有效质量, $|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态具有较重的有效质量。

3 应变对能带结构的影响

人们很早就认识到单轴应变使晶体的对称性发生变化, 使能带结构发生改变, 因此应变在 6、70 年代是研究半导体材料能带结构的强有力的手段之一, 它可以用来研究导带与价带的位置和 Γ 点与 X 点能带之间的关系。对于一级近似, 应变对能带的影响可以通过形变势来描述, 如果忽略能带 Γ_6 和 Γ_8 点态之间的相互作用, 对导带 (Γ_6 点) 应变使能带改变为^[9]:

$$\Delta E_c = C_e(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}). \tag{4}$$

C_e 为导带形变势, $\epsilon_{ii}(i = x, y, z)$ 为应变张量元, 对 $\Gamma_{15}(\Gamma_7 + \Gamma_8)$, 可以用轨道角动量操作 ($L = 3/2$) 来表示的应变哈密顿量来描述^[10]:

$$H_s = -a(\epsilon_{xx} + C.P.) - 3b[L_x^2 - 1/3L^2]\epsilon_{xx} + C.P.] - \sqrt{3}/3d[(L_x L_y + L_y L_x)\epsilon_{xy} + C.P.]. \tag{5}$$

a 为纯静水压 (轨道与应变作用) 形变势, b 和 d 为单轴 (轨道与应变作用) 形变势, $C.P.$ 表示循环置换操作, L 为轨道角动量算符, $L_i(i = x, y, z)$ 为其分量。根据 H_s 和不同方向的应变张量元, 就可以求出不同方向的应变哈密顿矩阵, 分析出应变对能带的影响。由于本文主要感兴趣 III-V 族材料的 $[001]$ 平面双轴应变, 在此只给出这一平面的应变矩阵。对 $[001]$ 应变, 应变张量元 ϵ_{ij} 为:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} &= \epsilon_{yy} = \epsilon_{\parallel}, \\ \epsilon_{zz} &= -2C_{12}/C_{11}\epsilon_{\parallel}, \\ \epsilon_{xy} &= \epsilon_{xz} = \epsilon_{yz} = 0. \end{aligned} \tag{6}$$

C_{11} 、 C_{12} 为弹性模量元, 根据 (5) 式应变哈密顿矩阵为:

$$H_s = \begin{bmatrix} -\Delta V_h - S & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta V_h + S & 2S \\ 0 & 2S & -\Delta_0 - \Delta V_h \end{bmatrix} \begin{matrix} |3/2, \pm 3/2\rangle \\ |3/2, \pm 1/2\rangle \\ |1/2, \pm 1/2\rangle \end{matrix} \tag{7}$$

其中: $\Delta V_h = 2a(1 - C_{12}/C_{11})\epsilon_{\parallel}$, $S = b(1 + 2C_{12}/C_{11})\epsilon_{\parallel}$, 从中可以看出纯静水压应变使 Γ_{15} 三个能带都下降 ΔV_h , 而单轴应变使 $|3/2, \pm 2/3\rangle$ 与 $|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态分裂 $2S$ 。对于应变, 还有一种熟知的利用泊松比 δ 表示的方法, $\delta = C_{12}/(C_{11} + C_{12})$ 。对于在 $[001]$ 平面上生长的外延层应变大小可以写成:

$$\epsilon_{\parallel} = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e}. \tag{8}$$

a_s 为衬底材料的晶格常数, a_e 为外延层的晶格常数。所以对于压缩应变 $a_e < a_s, \epsilon_{xx} < 0$, 由于 a 、 b 都为负值 (见表 2), 所以 $\Delta V_h > 0, S < 0$, 即压缩应变使外延材料比无应变时带隙增大, 并且重、轻空穴分裂, 重空穴高于轻空穴, 对伸张应变则与之相反。

4 利用 $\vec{K} \cdot \vec{P}$ 理论计算应变量子阱的能带结构的基本方法

对于给定体材料的哈密顿矩阵 H_0 和应变哈密顿矩阵 H_s , 将 H_s 看成为 H_0 的微扰, 根据量子

阱边界条件, 就可以求出应变量子阱的能带结构^[11]。只要阱宽不是太窄, 阱和垒中的波函数, 可以采用包络函数近似来计算。对于四带模型, 波函数为:

$$\Psi_n^{(l)} = F_n^{(l)}(z) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_n^{(l)}(\vec{r}). \quad (9)$$

(l) 为 w (阱) 或 b (垒), $u_n^{(l)}(\vec{r})$ 为布洛赫波的周期部分, $F_n^{(l)}(z)$ 为包络函数部分, n 表示量子数。由哈密顿矩阵 (2) 和 (7) 对于给出的每个能量 E 和 k_{\parallel} , 可以求出 k_z 的解为:

$$K_z^l = \alpha_j^l; \quad l = w \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad l = b \quad \text{或} \quad j = 5, 6, 7, 8. \quad (10)$$

对应于每个 a_j 的特征向量为:

$$F_j^{(l)} = \begin{bmatrix} f_{j1}^{(l)} \\ f_{j2}^{(l)} \end{bmatrix}. \quad l = w \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad \text{或} \quad l = b \quad j = 5, 6, 7, 8 \quad (11)$$

所以包络波函数的一般解为:

$$\text{阱中} \quad F^{(w)} = \sum_{j=1}^4 e^{i\alpha_j z} F_j^{(w)} A_j, \quad (12)$$

$$\text{垒中} \quad F^{(b)} = \sum_{j=5}^8 e^{i\alpha_j z} F_j^{(b)} A_j. \quad (13)$$

A_j 为待定系数, 它由边界条件给出。对于量子阱, 在阱和垒的边界处, 波函数及其一阶导数必须连续:

$$\begin{cases} F^{(w)} = F^{(b)}, \\ D^{(w)} \cdot \frac{\partial F^{(w)}}{\partial z} = D^{(b)} \cdot \frac{\partial F^{(b)}}{\partial z} \end{cases}. \quad (14)$$

$D^{(w)}$ 和 $D^{(b)}$ 为阱和垒的哈密顿矩阵中 k_z 的二次项系数, 它相当于空穴的有效质量张量。所以, 由 (13) 式代入 (14) 式中可以得到:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^4 e^{-i\alpha_j w} F_j A_j = 0, \\ \sum_{j=5}^8 e^{-i\alpha_j w} F_j' A_j = 0, \\ \sum_{j=1}^4 e^{i\alpha_j w} F_j A_j = 0, \\ \sum_{j=5}^8 e^{i\alpha_j w} F_j' A_j = 0. \end{cases} \quad (15)$$

其中: $F_j' = D^{(w)} F_j, j = 1, 2, 3, 4; F_j' = D^{(b)} F_j, j = 5, 6, 7, 8$ 。式中 w 为阱宽的一半。由于 F_j 为二维向量, 所以 (15) 式就是由边界条件产生的 4 带模型的 8×8 维边界条件方程。为了使 A 向量有非零解, 其系数矩阵行列式为零, 只有满足这一条件的 (10) 式中的 α_i 才是量子阱或应变量子阱的 k_z 向量, 所以对给定的 k_{\parallel} 求出满足上述条件的 E , 这一 $E \sim k_{\parallel}$ 关系就是量子阱或应变量子阱的能带。

5 态密度 DOS 的计算

由于能带的抛物线近似受到破坏, 计算态密度时, 可以根据其定义, 从能带直接进行数值求解, 在二维情况, 态密度为:

$$DOS = \sum_i \frac{1}{L_w \pi} k_{||} \cdot dk_{||} / dE_i \tag{15}$$

L_w 为阱宽, E_i 为第 i 个能带的能量。根据有效质量近似, 由 (15) 式得出二维情况 DOS 正比于载流子有效质量。由于混合效应对导带有效质量影响较小, 它的态密度将仍为台阶状函数。

6 应变 InGaAs/InP 量子阱的能带结构计算结果

GaAs、InAs 和 $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ 的 Luttinger 参数见表 2。其他材料参数则由抛物线内插得到。由于 GaAs 和 InP 材料的能带断续关系 ($\Delta E_C / \Delta E_g$) 不一致, 并且随材料变化而变化, 而外延生长在 InP 衬底上的 III-V 族材料的 $\Delta E_C / \Delta E_g \approx 40 \sim 60\%$, 我们取 50% 进行计算。根据表 2 给出的

表 2 材料的形变势和 Luttinger 参数 [2]

	γ_1	γ_2	γ_3	静水压形变势 a (eV)	单轴形变势 a (eV)
GaAs	6.95	2.25	2.86	-8.0	-1.7
InAs	19.67	8.37	9.29	-6.0	-1.8
$In_{0.47}Ga_{0.53}As$	10.8	4.4	4.4		

参数和第 3 部分中给出的方法, 就可以计算出应变量子阱的能带结构, 从而计算出量子阱能带的态密度。图 1、图 2、图 3 分别给出了计算得到阱宽为 10.0 nm 的 InGaAs/InP, 分别在 1%(伸张应变)、0%(无应变) 和 -1%(压缩应变) 三种情况下的的能带结构和态密度的数值结果, 图中虚

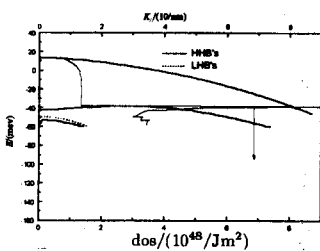


图 1 10.0 nm 阱宽, 1.0%(伸张应变) 量子阱能带结构及态密度
Fig.1 Energy band and density of state(DOS) of InGaAsP quantum well with 10.0 nm well width and 1% extended strains

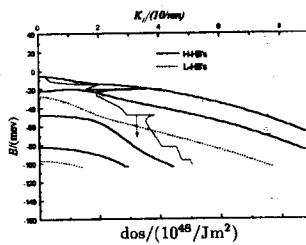


图 2 10.0 nm 阱宽, 0.0%(无应变) 量子阱能带结构及态密度
Fig.2 Energy band and density of state(DOS) of InGaAsP quantum well with 10.0 nm well width and no strains

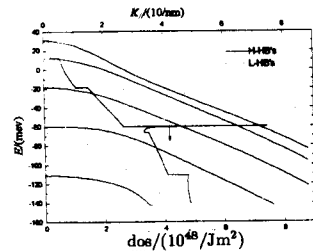


图 3 10.0 nm 阱宽 -1.0% 压缩应变量子阱能带结构及态密度
Fig.3 Energy band and density of state(DOS) of InGaAsP quantum well with 10.0 nm well width and 1% compressed strains

线表示 $|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态 (轻空穴) 的子带, 实线表示 $|3/2, \pm 3/2\rangle$ 态 (重空穴) 的子带。从中可以明显发现, 考虑能带之间混合 (mixing) 效应后, 态密度已变成非台阶状形式, 但仍还有台阶状的特性。无应变量子阱能带第一空穴子带只是在很有限 $k_{||}$ 范围之内有较轻的有效质量, 1% 压缩应

变使重、轻空穴子带分裂加大, 压缩应变使这一较轻的有效质量范围明显增大。伸张应变使最高空穴子带变为 $|3/2, \pm 1/2\rangle$ 态, 它在 k_{\parallel} 方向有较重的有效质量, 并且使第一、二子带间隔增加很大。因此, 在阱宽在 10.0 nm 情况下, 利用伸张应变, 虽然第一子带有较重的有效质量, 但由于子带间间隔增大, 子带数减少, 虽然它在能带刚出现的一段能量范围之内有较大的态密度 (在 13.5 meV 时态密度为 $0.74(10^{48}/\text{Jm}^2)$), 但在很大的一段能量范围之内 (13.23~ -38 meV), 它具有较低的态密度 ($< 1.34(10^{48}/\text{Jm}^2)$), 与 1% 压缩应变量子阱情况相近, 而无应变量子阱态密度小于 $1.5(10^{48}/\text{Jm}^2)$ 的范围只有 20 meV。半导体激光器激射一般都出现在这一能量范围之内, 所以在阱宽较宽时, 利用伸张应变也可以改善半导体激光器的器件性能。因此, 我们理论计算发现不仅压缩应变会使半导体激光器性能改善, 而且伸张应变也会使半导体激光器的阈值电流减小。

参 考 文 献

- 1 Adams A R. Band-structure engineering for low-threshold high-efficiency semiconductor lasers. *Electron. Lett.*, 1986, 22: 249
- 2 Yablonoitch E et al. Reduction of lasing threshold current density by the lowering of valence band effective. *J. Lightwave Technol.*, 1986, 4: 504
- 3 Osbourn G C. Strained-layer superlattices from lattice mismatched. *J. Appl. Phys.*, 1988, 53: 1586
- 4 Yablonoitch E, Kane E O. Band structure engineering of semiconductor lasers for optical communications. *J. Lightwave Technol.*, 1988, 6: 1992
- 5 O'Reilly E P et al. Improved performance due to suppression of spontaneous emission in tensile-strain semiconductor lasers. *Electron. Lett.*, 1991, 27: 1417
- 6 方俊鑫, 陆 栋. 固体物理学 (上册, 第六章). 上海: 上海科技出版社, 1985.
- 7 Luttinger J M. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: general theory. *Phys. Review*, 1956, 102: 1030
- 8 Luttinger J M, Kohn W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Phys. Review*, 1955, 97: 869
- 9 Mathieu H et al. Deformation potentials of the direct absorption edges of GaP. *J. Phys. Rev. B*, 1979, 19: 2209
- 10 Kleiner W H, Roth L M. Deformation potential in germanium from optical absorption lines for excision formation. *Phys.Rev.Letters*, 1959, 2: 334
- 11 Schuurmans M F H et al. New K · P theory for GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs type quantum wells. *Phys. Rev. B*, 1987, 36: 1554

The Calculation of InGaAs/InP Strained Quantum Well Energy Bands

Liu Baolin Huang Meichun

(Department of Physics, Xiamen University Xiamen 361005)

Abstract

We calculated the energy bands and state density of InGaAs/InP quantum well with 10.0 nm well width under 1.0% extended, 0% and 1% compress strains. It is found that there are very small state densities in extended strained quantum well with very large energy range. So, by using extended strain at large width, we can improve quantum well laser device characters.

Key words: $\vec{k} \cdot \vec{P}$ method, InGaAs/InP, strained quantum well, energy bands

刘宝林 男, 1963 年 5 月生, 副教授。1984 年毕业于中山大学物理系, 1987 年电子部 13 所硕士研究生毕业, 1993 年获吉林大学电子科学系博士学位。现在厦门大学物理系从事教学和科研工作, 主要研究领域为量子阱等低维半导体光电子器件和物理的理论和实验。