

InGaAs/GaAs 量子点阵列中的能级计算*

杨晓杰[†] 王 青 马文全 陈良惠

(中国科学院半导体研究所纳米光电子实验室 北京 100083)

(2006 年 12 月 11 日收到 2007 年 1 月 10 日收到修改稿)

根据八带 $k \cdot p$ 理论,在三维 InGaAs/GaAs 量子点阵列中求解 $k_x = k_y = k_z = 0$ 处的有效质量哈密顿 H_0 的本征值,得到 InGaAs 量子点中导带中电子基态 E_{C1} ,第一激发态 E_{C2} 和重空穴态 E_{HH1} 的能级.随着 In 组分从 30% 增加 100%,InGaAs 量子点中 E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长从 18.50 μm 蓝移到 11.87 μm ,而 E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁波长则从 1.04 μm 红移到 1.73 μm .随着量子点高度从 1.0 nm 增加到 5.0 nm,In_{0.5}Ga_{0.5}As 和 InAs 量子点中 E_{C1} 到 E_{C2} 的带内跃迁都从束缚态-连续态型转换到束缚态-束缚态型.对应于两种量子点的带内跃迁波长分别从 8.12 μm (5.90 μm)红移到 53.47 μm (31.87 μm),两种量子点中 E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁波长分别从 1.13 μm (1.60 μm)红移到 1.27 μm (2.01 μm).

关键词: InGaAs, 量子点, 带内跃迁, 八带 $k \cdot p$ 理论

PACC: 7320D, 7280E, 7115T

1. 引 言

自组织生长的应变 InGaAs 量子点中的载流子受到三维量子限制,而且晶格失配产生的应力显著地影响了电子限制势,使 InGaAs 量子点形成独特的电子和光学性质^[1-4].这些性质使得 InGaAs 量子点激光器具有低阈值电流、低功耗和高 T_0 值等优点^[1],InGaAs 量子点红外探测器具有对垂直入射红外辐射敏感、暗电流低、光电流增益高等优点^[5],因此自组织 InGaAs 量子点的实验和理论研究都备受关注^[1-16].虽然通过解一带(one-band)和四带(four-band)Schrödinger 方程可以分别计算出自组织 InGaAs 量子点中电子和空穴态能级^[2,8],但是导带和价带之间的强耦合的存在,需要利用八带(eight-band) $k \cdot p$ 理论精确地研究应变自组织 InGaAs 量子点的能级结构^[4],因为八带 $k \cdot p$ 理论考虑了自旋-轨道分裂效应和导带-价带耦合效应^[11].八带 $k \cdot p$ 理论计算结果表明 InGaAs 量子点中的带间跃迁和子带间跃迁能量与量子点中的 In 组分及其结构参数密切相关^[11,12].这些结果对优化 InGaAs 量子点激光器和量子点探测器都有重要参考价值.

本文在 Park 的八带 $k \cdot p$ 理论^[11,12]基础上,选择

InGaAs 量子点的高度、直径和中心间距等结构参数之间的依赖关系来分析应变 InGaAs/GaAs 量子点阵列的能级结构随 In 组分和量子点结构参数的变化规律.

2. 理论模型

扁平透镜形状的自组织 InGaAs 量子点可以被看作微型圆盘^[8,10],InGaAs/GaAs 量子点多层结构则被看作埋在 GaAs 中的三维 InGaAs 微型圆盘阵列.本文分析对象是生长在 GaAs(100)上的三维 InGaAs/GaAs 量子点阵列,图 1(a)和(b)分别是该阵列沿生长方向(z 轴)和量子点面内(x - y 面)的结构示意图. InGaAs 量子点的高度和半径分别用 l 和 R

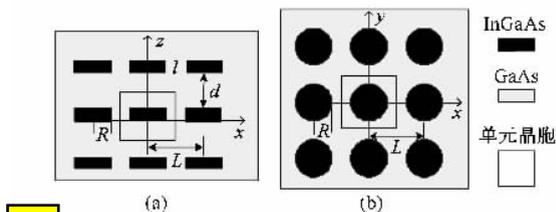


图 1 InGaAs/GaAs 量子点阵列沿 (a) 生长方向和 (b) 量子点面内的结构示意图

* 中国航天科工集团三院科技创新基金(批准号:HT3Y83582005)资助的课题.

[†] E-mail: yangxj@semi.ac.cn

表示 InGaAs 量子点面内中心间距和 GaAs 间隔层厚度分别表示为 L 和 d 。

八带 $k \cdot p$ 理论考虑了应力作用、自旋-轨道分

裂效应及导带-价带耦合等因素对量子点能级结构的影响, 相应的有效质量哈密顿 (Hamiltonian, H_0) 表示为^[11,17]

$$H_0 = \begin{pmatrix} A & 0 & -\sqrt{3}(V^\dagger - \nu^\dagger) & \sqrt{3}(U - u) & (V - v) & 0 & (U - u) & \sqrt{3}(V - \nu) \\ 0 & A & 0 & -(V^\dagger - \nu^\dagger) & \sqrt{3}(U - u) & \sqrt{3}(V - \nu) & -\sqrt{3}(V^\dagger - \nu^\dagger) & -(U - u) \\ -\sqrt{3}(V - \nu) & 0 & -(P + Q) & S_- & -R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}S_- & -\sqrt{2}R \\ \sqrt{3}(U - u) & -(V - \nu) & S_-^\dagger & -(P - Q) & -C & -R & \sqrt{2}Q & \frac{\sqrt{3}}{2}\Sigma_- \\ (V^\dagger - \nu^\dagger) & \sqrt{3}(U - u) & -R^\dagger & -C^\dagger & -(P - Q) & -S_+^\dagger & \frac{\sqrt{3}}{2}\Sigma_+ & -\sqrt{2}Q \\ 0 & \sqrt{3}(V^\dagger - \nu^\dagger) & 0 & -R^\dagger & -S_+ & -(P + Q) & \sqrt{2}R^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}S_+ \\ (U - u) & \sqrt{3}(V - \nu) & \frac{1}{\sqrt{2}}S_-^\dagger & \sqrt{2}Q & \frac{\sqrt{3}}{2}\Sigma_+^\dagger & \sqrt{2}R & -(P + \Delta) & -C \\ \sqrt{3}(V^\dagger - \nu^\dagger) & -(U - u) & -\sqrt{2}R^\dagger & \frac{\sqrt{3}}{2}\Sigma_-^\dagger & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S_+^\dagger & -C^\dagger & -(P + \Delta) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} A &= E_g + \left[\hat{p}_x \frac{1}{2m_c} \hat{p}_x + \hat{p}_y \frac{1}{2m_c} \hat{p}_y + \hat{p}_z \frac{1}{2m_c} \hat{p}_z \right] + a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + V_{c0}, \\ V &= \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{P_0}{\hbar} (\hat{p}_x - i\hat{p}_y), \nu = \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{P_0}{\hbar} (\epsilon_{xx}\hat{p}_x - i\epsilon_{yy}\hat{p}_y), \\ U &= \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{P_0}{\hbar} \hat{p}_z, u = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{P_0}{\hbar} \epsilon_{zz}\hat{p}_z, \\ P &= \frac{1}{2m_0} [\hat{p}_x\gamma_1\hat{p}_x + \hat{p}_y\gamma_1\hat{p}_y + \hat{p}_z\gamma_1\hat{p}_z] + P_\epsilon + V_{h0}, \\ Q &= \frac{1}{2m_0} [\hat{p}_x\gamma_2\hat{p}_x + \hat{p}_y\gamma_2\hat{p}_y + \hat{p}_z(-2\gamma_2)\hat{p}_z] + Q_\epsilon, \\ S_\pm &= \frac{1}{2m_0} 2\sqrt{3} [(\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y) \chi (\sigma - \delta) \hat{p}_z + \hat{p}_z \pi (\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y)], \\ R &= \frac{1}{2m_0} \sqrt{3} [(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) \mu (\hat{p}_x + i\hat{p}_y) - (\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \bar{\nu} (\hat{p}_x - i\hat{p}_y)], \\ C &= \frac{1}{2m_0} 2 [\hat{p}_z (\sigma - \delta - \pi \chi (\hat{p}_x - i\hat{p}_y)) - (\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \chi (\sigma - \delta - \pi) \hat{p}_z], \\ \Sigma_\pm &= \frac{1}{2m_0} 2\sqrt{3} \left\{ (\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y) \left[\frac{1}{3} (\sigma - \delta) + \frac{2}{3} \pi \right] \hat{p}_z + \hat{p}_z \left[\frac{2}{3} (\sigma - \delta) + \frac{1}{3} \pi \right] (\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y) \right\}, \\ \sigma - \delta &= \frac{1}{6} (-1 - \gamma_1 + 2\gamma_2 + 6\gamma_3), \pi = \frac{1}{6} (1 + \gamma_1 - 2\gamma_2), \\ \mu &= -\frac{1}{2} (\gamma_2 - \gamma_3), \bar{\nu} = \frac{1}{2} (\gamma_2 - \gamma_3), \\ E_p &= \frac{2m_0}{\hbar^2} P_0^2. \end{aligned} \quad (2)$$

这里的应力张量参量 ϵ_{xx} , ϵ_{yy} 和 ϵ_{zz} 分别定义为 $\epsilon_{xx} =$

$$\epsilon_{yy} = \frac{a_0 - a_{\text{InGaAs}}}{a_{\text{InGaAs}}} \text{ 和 } \epsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx}, \text{ 其中 } a_{\text{InGaAs}} = xa$$

+ (1-x)a₀ 是 InGaAs 的晶格常数, x 是 InGaAs 量子点中的 In 组分, a₀ 和 a 分别是 GaAs 和 InAs 体材料的晶格常数, C₁₁ 和 C₁₂ 是 InGaAs 的弹性模量参数. Luttinger 有效质量参数 γ_1 , γ_2 和 γ_3 在图 1 所示的单元晶胞中表示为

$$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3(x, y, z) = \begin{cases} \gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{13} & x^2 + y^2 \leq R^2, 0 < z \leq l \\ \gamma_{21}, \gamma_{22}, \gamma_{23} & \text{其他区域,} \end{cases} \quad (3)$$

这里的 $\gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{13}$ 和 $\gamma_{21}, \gamma_{22}, \gamma_{23}$ 分别是 InGaAs 和 GaAs 的 Luttinger 有效质量参数. m_0 是自由电子有效质量, Δ 是自旋-轨道分裂. 静力学形变能 P_ϵ 和剪切形变能 Q_ϵ 分别表示为

$$P_\epsilon = \begin{cases} P_0, & x^2 + y^2 \leq R^2, 0 < z \leq l, \\ 0, & \text{其他区域,} \end{cases} \quad (4)$$

$$Q_\epsilon = \begin{cases} Q_0, & x^2 + y^2 \leq R^2, 0 < z \leq l, \\ 0, & \text{其他区域.} \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{这里的 } P_0 = -2a_V \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx},$$

$$Q_0 = -b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx},$$

a_V 和 b 分别是价带中的静力学形变势和剪切形变势. InGaAs 量子点中的电子限制势 $V_e(x, y, z)$ 和空穴限制势 $V_h(x, y, z)$ 分别表示为

$$V_e(x, y, z) = \begin{cases} 0, & x^2 + y^2 \leq R^2, 0 < z \leq l \\ V_{e0}, & \text{其他区域,} \end{cases} \quad (6)$$

$$V_h(x, y, z) = \begin{cases} 0, & x^2 + y^2 \leq R^2, 0 < z \leq l \\ V_{h0}, & \text{其他区域.} \end{cases} \quad (7)$$

假设三维 InGaAs/GaAs 量子点阵列中的电子波函数为^[11]

$$\psi(r_e, r_h) = \frac{1}{L\sqrt{l+d}} \sum_{n_x, n_y, n_z} \begin{pmatrix} a_{n_x, n_y, n_z} \\ b_{n_x, n_y, n_z} \\ c_{n_x, n_y, n_z} \\ d_{n_x, n_y, n_z} \\ e_{n_x, n_y, n_z} \\ f_{n_x, n_y, n_z} \\ g_{n_x, n_y, n_z} \\ h_{n_x, n_y, n_z} \end{pmatrix} e^{i(k_{n_x}x + k_{n_y}y + k_{n_z}z)}, \quad (8)$$

把 $\psi(r_e, r_h)$ 带入 Schrödinger 方程

$$H_0 \psi(r_e, r_h) = E \psi(r_e, r_h) \quad (9)$$

中求解, 即可得到有效质量哈密顿 H_0 矩阵中的各个矩阵元, 再求哈密顿 H_0 的本征值得到 $k_x = k_y = k_z = 0$ 处的导带和价带中子带的能量.

3. 结果与分析

电子波函数 $\psi(r_e, r_h)$ 中的平面波数目 n_x, n_y 和 n_z 取值为 0, ± 1 , ± 2 和 ± 3 , 即在 $7 \times 7 \times 7$ 的三维 InGaAs/GaAs 量子点阵列中利用平面波函数展开法求解 $k_x = k_y = k_z = 0$ 处的有效质量哈密顿 H_0 , 得到 InGaAs 量子点导带中电子基态 E_{C1} , 第一激发态 E_{C2} 和电子限制势 V_e 以及重空穴能级 E_{HH1} . 计算中所用的 InGaAs 量子点的晶格常数 a_{InGaAs} , 电子有效质量 m_e , 静力学形变势 a_C, a_V , 剪切形变势 b , 弹性模量参数 C_{11} 和 C_{12} 和 Luttinger 有效质量参数 $\gamma_{11}, \gamma_{12}, \gamma_{13}$ 都可以近似为文献 [18] 中的 InAs 和 GaAs 相应物理参数的线性组合, 而 $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ 的带隙表示为 $E_{\text{gInGaAs}} = 1.424 - 1.5x + 0.4x^2$ ^[14]. 计算过程中的能量参考点选在无应变情况下的价带顶, 导带中子能级的参考点选在导带底 E_C , 即 $E_C = E_{\text{gInGaAs}} + [xa_{C1} + (1-x)a_{C2}] (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$, 这里的 a_{C1} 和 a_{C2} 分别是 InAs 和 GaAs 导带中的静力学形变势. 在 $k_x = k_y = k_z = 0$ 处的电子限制势 $V_e(x, y, z)$ 和空穴限制势 $V_h(x, y, z)$ 分别定义为 $V_{e0} = 0.7 \times (E_{\text{gGaAs}} - E_{\text{gInGaAs}})$ 和 $V_{h0} = -0.3 \times (E_{\text{gGaAs}} - E_{\text{gInGaAs}})$. InGaAs 量子点结构参数 R 和 L 与 l 的关联关系为 $R = 3l$ 和 $L = 2.5R = 7.5l$.

3.1. InGaAs/GaAs 量子点能级与 In 组分的关系

我们选择 InGaAs/GaAs 量子点的结构参数为 $l = 2.5 \text{ nm}$, $R = 7.5 \text{ nm}$, $L = 18.75 \text{ nm}$ 和 $d = 2 \text{ nm}$. 如图 2(a) 和 (b) 所示, 当 In 组分从 30% 增加到 100%, InGaAs 量子点导带中的子带 E_{C1} 和 E_{C2} , 电子限制势 V_{e0} , 重空穴带 E_{HH1}, E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长以及 E_{C1} 到 E_{HH1} 的带间跃迁波长都是 In 组分的函数, 即随着 In 组分的增加, E_{C1}, E_{C2}, V_{e0} 和 E_{HH1} 都线性地增大. 如图 2(c) 所示, E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长从 $18.50 \mu\text{m}$ 蓝移到 $11.87 \mu\text{m}$, 这是因为 E_{gInGaAs} 随着 In 组分的增加而迅速减小, V_{e0} 迅速增大, 即子

带 E_{C1} 和 E_{C2} 上的电子受到的量子限制增强, E_{C1} 和 E_{C2} 的能级间隔增大, 导致 E_{C2} 到 E_{C1} 的跃迁波长蓝移; 虽然 E_{C1} 和形变能 $xa_{C1} + (1-x)a_{C2} [\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}]$ 都随着 In 组分 x 的增加而增大, 但是 E_{InGaAs} 迅速减小导致 E_C 迅速降低, 而且 E_{HH1} 随着 In 组分增加而增大, 因此 E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁能量逐渐减小,

如图 2(d) 中相应的电子基态 E_{C1} 到重空穴态 E_{HH1} 的带间跃迁波长则从 $1.04 \mu\text{m}$ 红移到 $1.73 \mu\text{m}$, 这个波段涵盖了两个重要的光通讯波长 $1.31 \mu\text{m}$ 和 $1.55 \mu\text{m}$, 由此可见调节 InGaAs 量子点中的 In 组分是实现 $1.31 \mu\text{m}$ 和 $1.55 \mu\text{m}$ 的量子点激光器的有效方法.

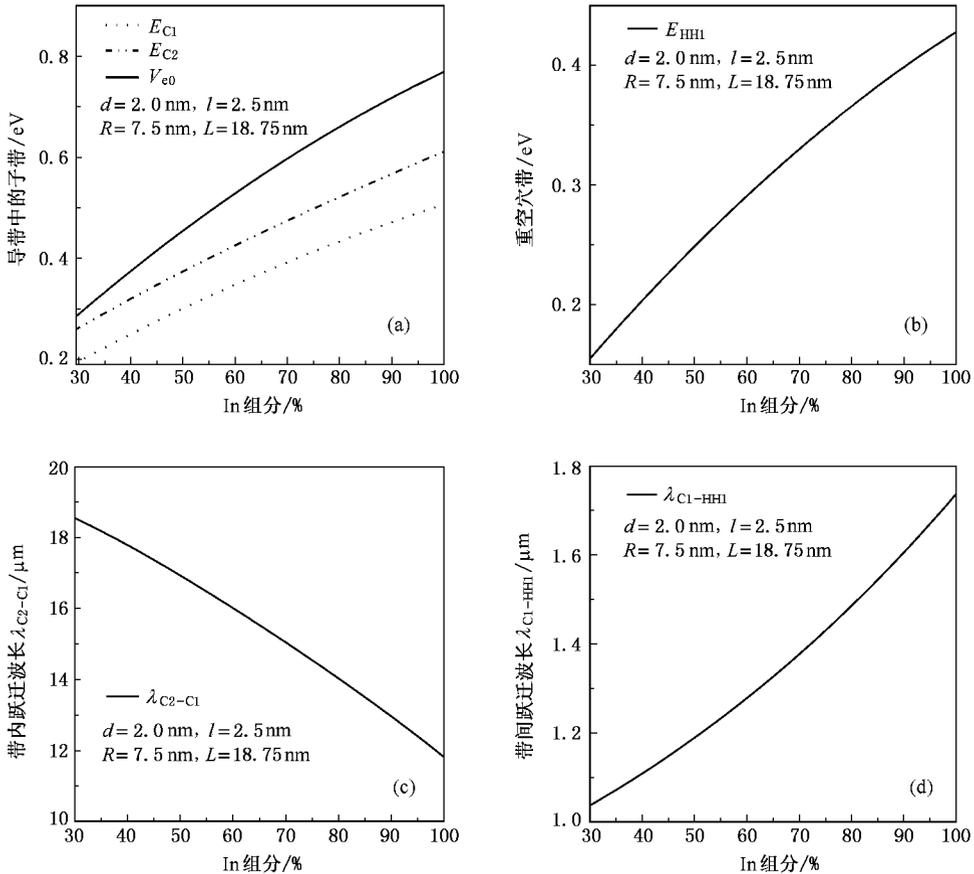


图 2 InGaAs/GaAs 量子点中 (a) 子带 E_{C1} , E_{C2} 和电子限制势 V_{e0} , (b) 重空穴带 E_{HH1} , (c) E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长 λ_{C2-C1} 以及 (d) E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁波长 λ_{C1-HH1} 与 In 组分的关系(量子点的结构参数为 $l=2.5 \text{ nm}$, $R=7.5 \text{ nm}$, $L=18.75 \text{ nm}$, $d=2.0 \text{ nm}$)

3.2. InGaAs/GaAs 量子点能级与其尺寸的关系

如果设定 GaAs 间隔层厚度为 $d = 2.0 \text{ nm}$, 当 InAs 量子点高度 l 从 1.0 nm 增加到 5.0 nm , 其半径和中心间距分别按照 $R = 3l$ 和 $L = 7.5l$ 增加, 因此量子点的高度 l 的增加反映了量子点尺寸的增加, 即量子点高度 l 的变化代表了量子点尺寸的变化. 如图 3(a) 和 (b) 所示, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 InAs/GaAs 量子点导带中的子带 E_{C1} 和 E_{C2} , 重空穴带 E_{HH1} , E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长以及 E_{C1} 到 E_{HH1} 的带间跃迁波长都是量子点高度 l 的函数. 在量子点高度 l 增加过程中, E_{C1} 一直是缓慢地减小, E_{C2} 的变化趋势

则从急剧减小转变为缓慢减小. 由于 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 和 InAs 量子点中的 In 组分不变, 它们的形变能和 V_{e0} 都保持不变. 对于 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ (InAs) 量子点, 当量子点高度 l 小于 1.7 nm (1.6 nm) 时, 量子点对载流子的量子限制很强, 能级间隔很大, 计算得到的 E_{C2} 上的电子能量远高于电子限制势 V_{e0} , 处于势阱之外的连续态. 相应的导带内电子跃迁发生在 E_{C1} 和连续态之间(我们近似地取连续态的能量约为 V_{e0}). 相应地, 当 l 从 1.0 nm 增加到 1.7 nm 时, 图 3(c) 中对应于 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 量子点的 E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁能量近似为 V_{e0} 和 E_{C1} 的能量差, 带内跃迁波长从

9.26 μm 蓝移到 8.12 μm ; 当 l 大于 1.7 nm 时, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 量子点的 E_{C2} 和 E_{C1} 能级上的电子都处于束缚态, 电子从 E_{C2} 到 E_{C1} 的跃迁对应的波长随着量子点的高度 l 增加而逐渐从 8.12 μm 红移到 53.47 μm . $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 量子点的高度 l 从 1 nm 增加到 2.25 nm, 对应的 E_{C2} 到 E_{C1} 的跃迁从束缚态到连续态型过渡到束缚态到束缚态型, 其波长处于 8—14 μm 的大气窗口波段, 适合于长波红外探测器. 同样, 当 l 从 1.0 nm 增加到 1.6 nm 时, 图 3(c) 中相应于 InAs 量子点的 E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长从 7.02 μm 线性蓝移到 5.90 μm . 高度 l 大于 1.6 nm 时, E_{C2} 到 E_{C1} 的跃迁波长随着量子点的高度 l 增加而逐渐从 5.90 μm 红移到 31.87 μm . InAs 量子点的高度 l 从 2.0 nm 增加到 2.8 nm, 对应的 E_{C2} 到 E_{C1} 的跃迁波长处于

8—14 μm 的大气窗口波段, 适合于基于束缚态到束缚态型带内跃迁的长波红外探测器. 如图 3(d) 所示, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 量子点中 E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁波长随着高度 l 增加而逐渐从 1.13 μm 红移到 1.27 μm . 对于 InAs 量子点, 当 l 小于 1.3 nm 时, E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁波长从 1.62 μm 轻微地蓝移到 1.60 μm , 这是因为 E_{HH1} 减小的速率大于 E_{C1} 减小的速率; 当 l 大于 1.3 nm 时, E_{C1} 能量继续减小, 而 E_{HH1} 减小趋势变缓并在 l 大于 1.7 nm 之后缓慢增大, 因此 E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁波长从 1.60 μm 逐渐红移到 2.01 μm . 这些结果表明, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 和 InAs 量子点的尺寸变化对其导带中带内跃迁波长的影响更加显著, 调节 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 和 InAs 量子点的尺寸可以优化 8—14 μm 长波量子点红外探测器的性能.

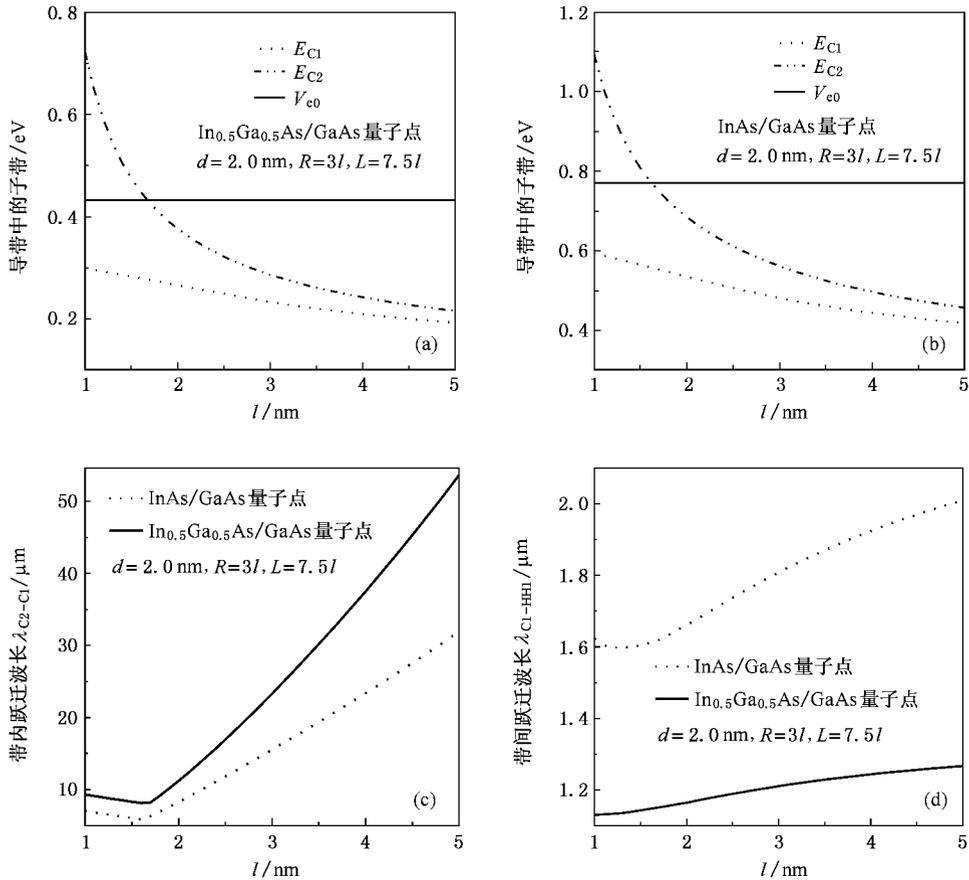


图 3 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}/\text{GaAs}$ 量子点的 (a) 子带 E_{C1} , E_{C2} 和电子限制势 V_{e0} , InAs/GaAs 量子点的 (b) 子带 E_{C1} , E_{C2} 和电子限制势 V_{e0} , (c) E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长 λ_{C2-C1} 以及 (d) E_{C1} 到 E_{HH1} 的带内跃迁波长 $\lambda_{C1-\text{HH1}}$ 与量子点高度 l (结构参数) 的关系 ($\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}/\text{GaAs}$ 和 InAs/GaAs 量子点的结构参数一样, 即 l 从 1.0 nm 增加到 5.0 nm, $R=3l$, $L=7.5l$, $d=2.0$ nm)

4. 结 论

八带 $k \cdot p$ 理论计算结果表明, InGaAs/GaAs 量子点导带中子能级 E_{C1} 和 E_{C2} 重空穴带 E_{HH1} , E_{C2} 到 E_{C1} 的带内跃迁波长, 以及 E_{C1} 到 E_{HH1} 的跃迁波长是 In 组分和量子点尺寸的函数. 调节 In 组分或者通过

选择生长过程中的实验参数来调节量子点尺寸而改变 InGaAs/GaAs 量子点的 E_{C1} , E_{C2} 和 E_{HH1} 等子带的能量, 从而得到合适的 E_{C1} 到 E_{C2} 的带内跃迁波长或者 E_{C1} 到 E_{HH1} 的带间跃迁波长, 这有益于利用导带带内跃迁的 InGaAs/GaAs 量子点红外探测器和基于带间跃迁的 InGaAs/GaAs 量子点激光器的研究.

- [1] Masumoto Y , Takagahara T 2002 *Semiconductor Quantum Dots : Physics , Spectroscopy and Applications* (Berlin : Springer-Verlag) p457
- [2] Cusack M A , Briddon P R , Jaros M 1996 *Phys. Rev. B* **54** R2300
- [3] Jiang H , Singh J 1998 *IEEE J. Quantum Electron.* **34** 1188
- [4] Pryor C 1998 *Phys. Rev. B* **57** 7190
- [5] Ryzhii V 1996 *Semicond. Sci. Technol.* **11** 759
- [6] Chakrabarti S , Stiff-Roberts A D , Su X H , Bhattacharya P , Ariyawansa G , Perera A G U 2005 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **38** 2135
- [7] Krishna S , Forman D , Annamalai S , Dowd P , Varangis P , Tumolillo T Jr , Gray A , Zilko J , Sun K , Liu M , Campbell J , Carothers D 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 193501
- [8] Li S S , Xia J B , Xu Z Y , Ge W K , Wang X R , Wang Y , Wang J , Chang L L 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11575
- [9] Li S S , Xia J B 1997 *Phys. Rev. B* **55** 15434
- [10] Jiang X , Li S S , Tidrow M Z 1999 *Physica E* **5** 27
- [11] Park S H , Ahn D , Lee Y T , Zhuang S L 2003 *Jpn. J. Appl. Phys.* **42** 144
- [12] Park S H , Kim J J , Kim H M 2003 *J. Kor. Phys. Soc.* **42** 706
- [13] Fonseca L R C , Jimenez J L , Leburton J P , Martin R M 1998 *Phys. Rev. B* **57** 4017
- [14] Sun Y W , Ma W Q , Yang X J , Qu Y H , Hou S H , Jiang D S , Sun B Q , Chen L H 2005 *Chinese J. Semiconductors* **26** 2092 (in Chinese)[孙永伟、马文全、杨晓杰、屈玉华、侯识华、江德生、孙宝权、陈良惠 2005 半导体学报 **26** 2092]
- [15] Liu Y M , Yu C Y , Yang H B , Huang Y Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5023 (in Chinese)[刘玉敏、俞重远、杨红波、黄永箴 2006 物理学报 **55** 5023]
- [16] Liang S , Zhu H L , Pan J Q , Wang W 2006 *Chin. Phys.* **15** 1114
- [17] Bahder T B 1990 *Phys. Rev. B* **41** 11992
- [18] Chuang S L 1995 *Physics of Optoelectronics Devices* (New York : Wiley) p150

Calculation of energy levels in InGaAs/GaAs quantum dot array^{*}

Yang Xiao-Jie[†] Wang Qing Ma Wen-Quan Chen Liang-Hui

(*Nano-Optoelectronics Laboratory , Institute of Semiconductors , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100083 , China*)

(Received 11 December 2006 ; revised manuscript received 10 January 2007)

Abstract

The subbands of the ground state E_{C1} , the first excited state E_{C2} and heavy hole state E_{HH1} are calculated by solving the eigenvalues of effective-mass Hamiltonian H_0 which is derived from eight-band $k \cdot p$ theory and the calculations are performed at $k_x = k_y = k_z = 0$ for the three-dimensional array of InGaAs/GaAs quantum dots (QDs). With indium content in InGaAs QDs gradually increasing from 30% to 100% , the intersubband transition wavelength of E_{C2} to E_{C1} blue-shifts from 18.50 to 11.87 μm , while the transition wavelength of E_{C1} to E_{HH1} red-shifts from 1.04 to 1.73 μm . With the sizes of $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ and InAs QDs increasing from 1.0 to 5.0 nm , the intersubband transition from E_{C1} to E_{C2} transforms from bound-state-to-continuum-state to bound-state-to-bound-state , and the corresponding intersubband transition wavelengths red-shift from 8.12 μm (5.90 μm) to 53.47 μm (31.87 μm) , respectively , and the transition wavelengths of E_{C1} to E_{HH1} red-shift from 1.13 μm (1.60 μm) to 1.27 μm (2.01 μm) , respectively .

Keywords : InGaAs , quantum dot , intersubband transition , eight-band $k \cdot p$ theory

PACC : 7320D , 7280E , 7115T

^{*} Project supported by the Third Academy of China Aerospace Science & Industry Corp. for Scientific Innovation Research (Grant No. HT3Y83582005).

[†] E-mail : yangxj@semi.ac.cn