

转移矩阵理论及其在 III/V 族半导体量子阱体系中的应用*

李龙龙 徐文 曾雉†

(中国科学院固体物理研究所材料物理重点实验室,合肥 230031)

(2008 年 12 月 17 日收到,2009 年 1 月 6 日收到修改稿)

应用转移矩阵方法求解三种不同量子阱体系中基于单带有效质量模型和包络函数近似下的一维定态薛定谔方程.首先,通过比较 I 型单量子阱 GaAlAs/GaAs/GaAlAs 体系的解析解和数值解,该方法的精确性得到了验证.其次,与 II 型断代量子阱 AlSb/InAs/GaSb/AlSb 系统的光致发光谱实验结果比较证实了该方法的适用性.最后,利用该方法推广计算了基于 GaAs/GaAlAs 材料的 I 型耦合多量子阱体系的子带能级和波函数,说明了方法的通用性和实用性.

关键词:量子阱,转移矩阵方法,光致发光

PACC: 7320D, 7115P, 7855E

1. 引言

大半个世纪以来,半导体层状结构材料(如异质结、量子阱和超晶格)中的量子物理机制一直受到人们广泛的关注.除了在高速微电子学器件(光探测器、激光器、高迁移率晶体管等)上的工业应用外,这些材料的模型体系还提供了很好的理论研究平台.在垂直于材料生长方向的层状面上,材料晶格有着很好的平移对称性,电子在这些层状面上的运动可以看成是准自由的,但是在生长方向上平移对称性被破坏,导致一维附加局域势的产生,限制了电子在生长方向上的运动.因此,我们只需要在有效质量模型和包络函数近似的框架下,应用简单的一维定态薛定谔方程来研究这些层状材料中电子的量子化状态(束缚态能量和波函数).在最近几十年里,对于制造红外光电探测器件的 III/V 族半导体层状结构材料的研究是一个比较活跃的领域^[1,2].除了大量的实验工作之外^[3-5],理论工作也开展很多,主要用来描述这些层状结构材料中电子态的量子物理性质^[6-8].当这些层状结构材料用于器件设计时,能带结构模拟变得相当重要,需要求解在单带或多带有效质量模型和包络函数近似下的一维定态薛定谔方

程.在大多数情形下,求解这样的一维薛定谔方程可以用一些数值方法实现,如三点格式的有限差分方法^[9]和边值打靶方法^[10,11]等.

本文首先阐述了一维定态薛定谔方程的数值求解方法即转移矩阵方法(transfer matrix method)^[12],这种数值理论方法非常适合于任意形状的一维限制势量子阱体系.然后利用该方法数值求解了 I 型单量子阱 $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ 体系中的电子子带能量和 II 型断代量子阱 AlSb/InAs/GaSb/AlSb 体系中的空穴子带到电子子带的跃迁能量,与 I 型单量子阱体系的解析结果和 II 型断代量子阱体系的光致发光谱实验结果相比较,验证该数值理论方法的精确性和适用性.最后在该理论方法的基础上,推广计算了基于 GaAs/GaAlAs 材料的 I 型耦合多量子阱体系中的子带能级和波函数,从而体现了转移矩阵理论方法的通用性和实用性.

2. 理论方法

为方便起见,考虑典型的 I 型半导体单量子阱体系 A/B/A,即一块较薄的半导体材料层 B 嵌在两块较厚的半导体材料层 A 之间形成一块三明治结构.假定两块材料的界面平行于 $x-y$ 平面,则垂直于

* 国家重点基础研究发展计划(批准号:2005CB623603)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: zeng@theory.issp.ac.cn

界面的方向为 z 方向(通常称为生长方向),并且假设材料 A 的层厚为 d_A 材料 B 的层厚为 d_B .在有效质量近似下,每一种半导体组成材料的本征波函数可以表示成一维包络函数和二维自由平面波的乘积形式.对于考虑的单量子阱体系,假定每一种组分半导体材料的导带(价带)带边在 $k=0$ 是非简并的,且带边电子(空穴)有效质量为标量.沿着生长方向(z 方向),导带底和价带顶的能带如图 1 所示.通常需要分别计算导带电子和价带空穴全部的子带能级和对应的子带波函数,但在此仅以导带电子为例,阐述如何用转移矩阵方法求量子阱中的电子本征态即子带能级和对应的子带波函数.

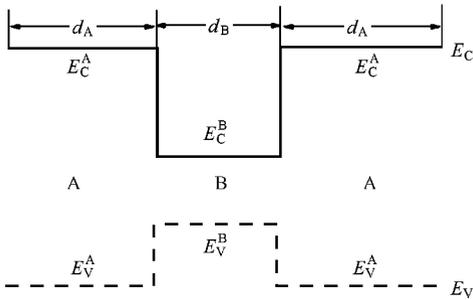


图 1 I 型单量子阱 A/B/A 体系的导带底和价带顶的能带示意图

在上述的简化和假定前提下,导带电子的包络函数 $\psi(z)$ 满足有效质量近似下的一维定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi(z) + V(z)\psi(z) \right] = E\psi(z), \tag{1}$$

式中, $m^*(z)$ 是导带电子有效质量, $V(z)$ 是导带电子受到的限制势, $V(z) = E_C(z)$, $m^*(z)$ 和 $V(z)$ 均为坐标 z 的函数.对于组分半导体材料 A 或 B 而言,薛定谔方程(1)可以写成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_A^*} \frac{d^2}{dz^2} + E_C^A - E \right] \phi_A(z) = 0 \tag{2a}$$

$(d_B/2 < |z| < d_B/2 + d_A),$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_B^*} \frac{d^2}{dz^2} + E_C^B - E \right] \phi_B(z) = 0 \tag{2b}$$

$(0 < |z| < d_B/2),$

式中, m_A^* 和 E_C^A (m_B^* 和 E_C^B) 分别是组分材料 A(B) 的电子有效质量和导带带边能量.按照有限元的思想,将组分半导体材料 A(B) 的层厚 d_A (d_B) 分成 N_A (N_B) 等份,每等份的长度为 Δ_A (Δ_B),一般而言, N_A (N_B) 很大,因此 Δ_A (Δ_B) 很小.运用标准的转移矩阵技术^[13],可以得到如下系列的迭代关系:

$$\begin{bmatrix} \phi_A(-d_B/2) \\ \phi'_A(-d_B/2) \end{bmatrix} = \left[\prod_{n=1}^{N_A} \begin{bmatrix} \cos(k_A \Delta_A) & \sin(k_A \Delta_A)/k_A \\ -k_A \sin(k_A \Delta_A) & \cos(k_A \Delta_A) \end{bmatrix} \right] \begin{bmatrix} \phi_A(-d_A - d_B/2) \\ \phi'_A(-d_A - d_B/2) \end{bmatrix}, \tag{3a}$$

$$\begin{bmatrix} \phi_B(d_B/2) \\ \phi'_B(d_B/2) \end{bmatrix} = \left[\prod_{n=1}^{N_B} \begin{bmatrix} \cos(k_B \Delta_B) & \sin(k_B \Delta_B)/k_B \\ -k_B \sin(k_B \Delta_B) & \cos(k_B \Delta_B) \end{bmatrix} \right] \begin{bmatrix} \phi_B(-d_B/2) \\ \phi'_B(-d_B/2) \end{bmatrix}, \tag{3b}$$

$$\begin{bmatrix} \phi_A(d_A + d_B/2) \\ \phi'_A(d_A + d_B/2) \end{bmatrix} = \left[\prod_{n=1}^{N_A} \begin{bmatrix} \cos(k_A \Delta_A) & \sin(k_A \Delta_A)/k_A \\ -k_A \sin(k_A \Delta_A) & \cos(k_A \Delta_A) \end{bmatrix} \right] \begin{bmatrix} \phi_A(d_B/2) \\ \phi'_A(d_B/2) \end{bmatrix}, \tag{3c}$$

式中, $k_A^2 = 2m_A^*(E_C^A - E)/\hbar^2$, $k_B^2 = 2m_B^*(E_C^B - E)/\hbar^2$.利用波函数在界面上满足 BenDaniel-Duke 边界条件^[14],又可以得到如下的关系式:

$$\begin{bmatrix} \phi_B(-d_B/2) \\ \phi'_B(-d_B/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m_B^*/m_A^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_A(-d_B/2) \\ \phi'_A(-d_B/2) \end{bmatrix}, \tag{4a}$$

$$\begin{bmatrix} \phi_A(d_B/2) \\ \phi'_A(d_B/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m_A^*/m_B^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_B(d_B/2) \\ \phi'_B(d_B/2) \end{bmatrix}. \tag{4b}$$

结合(3)(4)式,可以得到下列表达式:

$$\begin{bmatrix} \phi_A(d_A + d_B/2) \\ \phi'_A(d_A + d_B/2) \end{bmatrix} = T(E) \begin{bmatrix} \phi_A(-d_A - d_B/2) \\ \phi'_A(-d_A - d_B/2) \end{bmatrix}. \tag{5}$$

这里 $T(E)$ 称为转移矩阵,只是能量 E 的函数,其具体形式为

$$T(E) = \left[\prod_{n=1}^{N_A} \begin{bmatrix} \cos(k_A \Delta_A) & \sin(k_A \Delta_A)/k_A \\ -k_A \sin(k_A \Delta_A) & \cos(k_A \Delta_A) \end{bmatrix} \right] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m_A^*/m_B^* \end{bmatrix}$$

$$\times \left[\prod_{n=1}^{N_B} \begin{bmatrix} \cos(k_B \Delta_B) & \sin(k_B \Delta_B) / k_B \\ -k_B \sin(k_B \Delta_B) & \cos(k_B \Delta_B) \end{bmatrix} \right] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & m_B^* / m_A^* \end{bmatrix} \\ \times \left[\prod_{n=1}^{N_A} \begin{bmatrix} \cos(k_A \Delta_A) & \sin(k_A \Delta_A) / k_A \\ -k_A \sin(k_A \Delta_A) & \cos(k_A \Delta_A) \end{bmatrix} \right], \quad (6)$$

式中等份长度 $\Delta_A = \Delta_B = \Delta = (2d_A + d_B) / (2N_A + N_B)$. 利用波函数在量子阱体系的最左端和最右端满足 Dirichlet 边界条件 $\phi_A(-d_A - d_B/2) = \phi_A(d_A + d_B/2) = 0$, 可得到体系的束缚态本征能量和波函数, 由此就求得导带电子的子带能量和对应的子带波函数. 同理, 价带空穴的子带能量和对应的子带波函数也能求出.

3. 结果及讨论

在这个简单的理论模型中, 需要用到量子阱体系组分材料的一些最基本的性质参数, 如材料的禁带宽度、电子和空穴的有效质量. 表 1 列出了 I 型单量子阱体系和 II 型断代量子阱体系组分材料的禁带宽度、电子和空穴有效质量等基本参数, 表中 $m_0 = 9.1091 \times 10^{-31}$ kg 为自由电子质量, 组分材料 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的禁带宽度、电子和空穴的有效质量是通过 AlAs 和 GaAs 材料对应的性质参数线性插值得到 ($\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 材料中 Al 元素的摩尔分数 x 取值在 0—1). 为了得到该部分的数值结果, 还需要知道量子阱体系组分材料之间导(价)带的带边能量不连续值, 亦即导(价)带的带阶 (band-offset). 对于 I 型单

量子阱 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 体系, GaAs 部分是量子阱体系的活性区, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 部分是体系的势垒区. 组分材料之间的导带带阶可以取为 $\Delta E_C = E_C^A - E_C^B = 0.67 \times 1.247x$ eV, 其中 A 代表 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 材料, B 代表 GaAs 材料. 对于 II 型断代量子阱 $\text{AlSb}/\text{InAs}/\text{GaSb}/\text{AlSb}$ 体系, 其导带底和价带顶的能带如图 2 所示, 体系的活性区部分是 InAs 和 GaSb, 两端的 AlSb 部分仍然是体系的势垒区. 组分材料之间的价带带阶分别为^[15] $\Delta E_V(\text{AlSb}/\text{InAs}) = E_V^{\text{AlSb}} - E_V^{\text{InAs}} = 0.18$ eV, $\Delta E_V(\text{InAs}/\text{GaSb}) = E_V^{\text{InAs}} - E_V^{\text{GaSb}} = -0.56$ eV, $\Delta E_V(\text{GaSb}/\text{AlSb}) = E_V^{\text{GaSb}} - E_V^{\text{AlSb}} = 0.38$ eV. 比较图 1, 图 2 可以明显地看出, II 型断代量子阱系统和 I 型量子阱系统的差别. 首先, 两种量子阱体系对电子和空穴的限制区域不同, 前者体系中的电子和空穴分别被束缚在不同的材料中, 如电子被束缚在 InAs 中和空穴被束缚在 GaSb 中, 而后者体系中的电子和空穴被限制在同一种材料(如 GaAs)中. 其次, 前者体系的导带底和价带顶发生了明显的交叠, 即 GaSb 的价带顶比 InAs 的导带底高(大约高出 150 meV)^[15], 而后者体系的导带底始终高于价带顶.

为了验证上述方法的精确性, 我们对不同 GaAs

表 1 I 型量子阱体系和 II 型断代量子阱体系组分材料的性质参数

组分材料	AlAs	GaAs	AlSb	InAs	GaSb	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$
禁带宽度/eV	2.673	1.426	2.300	0.410	0.810	$1.426 + 1.247x$
电子有效质量/g	$0.150m_0$	$0.067m_0$	$0.185m_0$	$0.022m_0$	$0.041m_0$	$(0.067 + 0.083x)m_0$
空穴有效质量/g	$0.760m_0$	$0.620m_0$	$0.980m_0$	$0.399m_0$	$0.296m_0$	$(0.620 + 0.140x)m_0$

厚度的 I 型单量子阱 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 体系中的电子子带能量本征值进行了计算, 并与解析理论结果^[16]作比较. Al 的摩尔分数 x 取 0.75, GaAs 厚度取 2—20 nm, 两端势垒区 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的厚度固定为 20 nm, 结果列于表 2. 从表 2 的数据对比可以看出, 数值结果相当可靠和准确, 从而验证了转移矩阵方法的精确性. 对于 II 型断代量子阱 $\text{AlSb}/\text{InAs}/\text{GaSb}/\text{AlSb}$ 体系, 固定 GaSb 的宽度为 60 子

层 (ML), 两端势垒区 AlSb 的厚度为 80 ML, InAs 的厚度从 2.5 ML 变化到 8.5 ML. 这里采用 ML 作单位, 1 ML = $0.5a$, 其中 a 为晶格常数. 我们计算不同 InAs 厚度下体系的跃迁能量, 并与光致发光光谱实验结果^[17]作了比较, 图 3 分别给出了理论结果和实验结果. 从图 3 可以看出, 理论结果和实验结果符合得较好, 由于实验结果是直接从分子束外延方法生长的样品上测量得到, 从而证实了该理论方法的适

表 2 在不同 GaAs 厚度的 I 型单量子阱 $Ga_{0.25}Al_{0.75}As/GaAs/Ga_{0.25}Al_{0.75}As$ 体系中的电子子带能量本征值

GaAs 厚度/nm	解析解		数值解	
	E_1/meV	E_2/meV	E_1/meV	E_2/meV
2	270.765	—	270.766	—
4	129.451	512.393	129.452	512.396
6	75.775	307.023	75.775	307.026
8	49.775	201.177	49.775	201.179
10	35.205	141.851	25.205	141.853
12	26.218	105.411	26.218	105.412
16	16.159	64.812	16.159	64.813
20	10.949	43.869	10.949	43.869

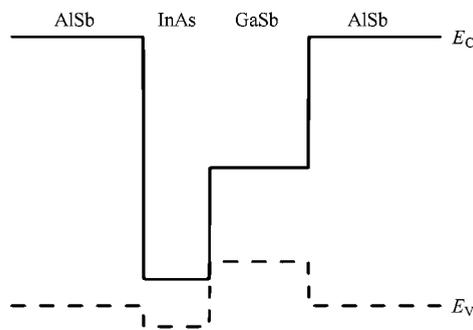


图 2 II 型断代量子阱 AlSb/InAs/GaSb/AlSb 体系的导带底和价带顶的能带示意图

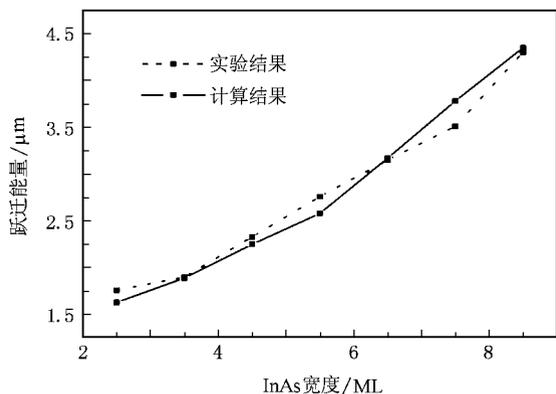


图 3 跃迁能量的数值理论结果和实验结果的比较

用性,可以为量子阱光电器件设计提供一些理论上的能带结构模拟和预测。

当阱与阱之间存在耦合时,多量子阱体系中电子和空穴的本征态与单量子阱有着很大的不同.图 4(a)给出了一个含 10 个阱的多量子阱体系的能带示意图, z 是体系生长方向的坐标.取 $x = 0.2$, 中间

活性区的势阱材料 GaAs 和势垒材料 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 的厚度均为 5 nm,两端势垒区材料 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 的厚度为 20 nm,我们计算了该体系中电子和空穴的基态子带波函数,结果示于图 4(b).从图 4(b)可以看出:(1)由于阱与阱之间的耦合,电子和空穴的波函数在相邻阱中存在明显的交叠;(2)电子和空穴的概

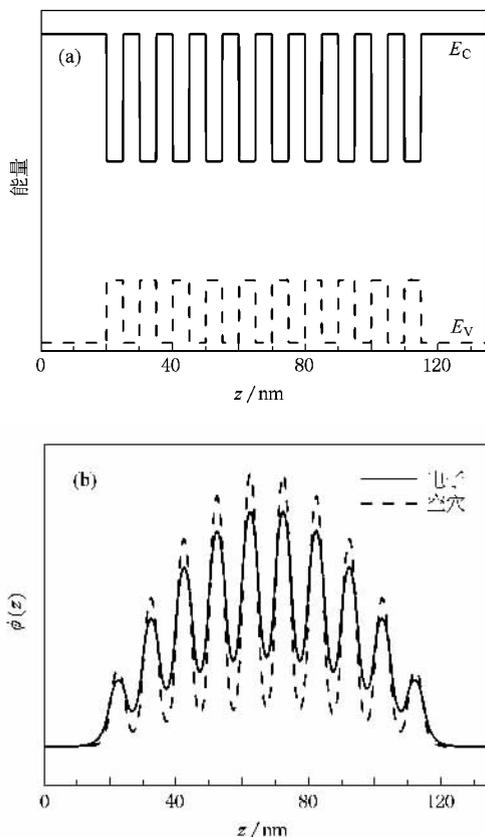


图 4 含有 10 个阱的多量子阱体系导带 E_C 和价带 E_V 的能带示意图及体系中电子和空穴的基态子带波函数 (a)能带示意图,(b)基态子带波函数

率分布在每个阱中是不相等的,这个特点与无限长度的周期性超晶格明显不同(超晶格中电子和空穴在每个阱中的概率分布相等)这是由多量子阱的有限长度效应引起的(3)空穴的基态波函数比电子更局域一些,这是由于电子的有效质量比空穴的有效质量小(见表1),导致空穴受到的束缚作用比电子大.由此可知,任意一个耦合多量子阱体系中的电子态都可以用转移矩阵方法求得.实际上,由于转移矩阵方法是按照有限元思想来实现,因此只要给定一维势的形状,用该方法就可以求出体系的全部电子态,如研究量子阱体系在外电场作用下的量子 Stark 效应^[18]、求解与泊松方程耦合后的一维薛定谔方程^[19]、计算多势垒在有无电场下的共振隧穿系数^[20]等.这里我们主要阐述一种基本的数值方法,并未涉及如上所述的具体应用计算.

4. 结 论

本文利用转移矩阵方法求解了三种不同量子阱体系中的一维薛定谔方程,通过与解析理论结果和实验结果的比较以及对该方法的推广应用,说明了转移矩阵方法的精确性、适用性和通用性.该方法最大的优点在于,只要给定量子阱体系中电子或空穴受到任意形状的一维限制势,体系的束缚态本征能量和波函数便可以完全求出,即求解了该势场下体系的一维薛定谔方程.

本文的部分计算工作在中国科学院合肥物质科学研究院计算中心以及上海超级计算中心的高性能计算机上完成,谨致谢意.

- [1] Levine B F 1993 *J. Appl. Phys.* **74** R1
- [2] Li N, Yuan X Z, Li N, Lu W, Li Z F, Dou H F, Shen X C 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 797 (in Chinese) [李娜,袁宪漳,李宁,陆卫,李志峰,窦红飞,沈学础 2000 物理学报 **49** 797]
- [3] Yang R Q, Pei S S 1996 *J. Appl. Phys.* **79** 8197
- [4] Vurgaftman I, Meyer J R, Julien F H, Ram-Mohan L R 1998 *Appl. Phys. Lett.* **73** 711
- [5] Hasenberg T C, Day P S, Shaw E M, Magarrell D J, Olesberg J T, Yu C, Boggess T F, Flatte M E 2000 *J. Vac. Sci. Technol. B* **18** 1623
- [6] Bastard G 1981 *Phys. Rev. B* **24** 5693
- [7] Altarelli M 1983 *Phys. Rev. B* **28** 842
- [8] Hales V J, Poulter A J, Nicholas R J 2000 *Physica E* **7** 84
- [9] Cooney P J, Kanter E P, Vager Z 1981 *Am. J. Phys.* **49** 76
- [10] Killingbeck J P, Gordan N A, Witwit M R M 1995 *Phys. Lett. A* **206** 279
- [11] Killingbeck J P 1991 *Microcomputer Algorithms: Actions from Algebra* (Bristol: Adam Hilger) p133
- [12] Vassell M O, Lee J S, Lockwood H F 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 5206
- [13] Fu Y, Chao K A 1989 *Phys. Rev. B* **40** 8349
- [14] BenDaniel D J, Duke C B 1966 *Phys. Rev.* **152** 683
- [15] Vurgaftman I, Ram-Mohan L R 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 5815
- [16] Basu P K 1997 *Theory of Optical Processes in Semiconductors* (Oxford: Clarendon Press) p244
- [17] Paul S F P, Fouckhardt H 2001 *Phys. Lett. A* **286** 199
- [18] Susa N, Nakahara T 1992 *Electron. Lett.* **28** 941
- [19] Cruz Serra A M, Abreu Santos H 1991 *J. Appl. Phys.* **70** 2734
- [20] Vatannia S, Goldenblat G 1996 *IEEE J. Quantum Electron.* **32** 1093

Formalism of the transfer matrix and its application to III / V semiconductor quantum well systems *

Li Long-Long Xu Wen Zeng Zhi[†]

(Key Laboratory of Materials Physics , Institute of Solid State Physics , Chinese Academy of Sciences , Hefei 230031 , China)

(Received 17 December 2008 ; revised manuscript received 6 January 2009)

Abstract

A formalism of transfer matrix method is presented and used to solve a one-dimensional time-independent Schrödinger equation based on a simple one-band effective mass model and the envelope function approximation. The accuracy of this method is proved by comparing the numerical solution and analytical solution for a GaAs-based type I single quantum well system, and its applicability is demonstrated by experimental photoluminescence results of the InAs/GaSb-based type II and broken-gap quantum well structures. The formalism is extended to calculating the subband energies and corresponding wavefunctions in the GaAs/GaAlAs-based type I coupled multiple quantum well systems, showing that the formalism is universal and practical.

Keywords : quantum well , transfer matrix method , photoluminescence

PACC : 7320D , 7115P , 7855E

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2005CB623603).

[†] Corresponding author. E-mail : zzeng@theory.issp.ac.cn