

GaAs 薄膜的有效量子限制长度及其极化子特性*

刘炳灿¹⁾ 李华¹⁾ 严亮星²⁾ 孙慧²⁾ 田强^{2)†}

1) (装甲兵工程学院基础部, 北京 100072)

2) (北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2013年5月18日收到; 2013年6月21日收到修改稿)

本文用分数维方法研究 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 衬底上 GaAs 薄膜中的极化子特性, 提出了确定 GaAs 薄膜的有效量子限制长度的一个新方法, 解决了原来方法中在衬底势垒处有效量子限制长度发散的困难, 得到了 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 衬底上 GaAs 薄膜中的极化子的维数和结合能.

关键词: 分数维方法, 极化子, GaAs 薄膜

PACS: 73.61.-r, 73.90.+f

DOI: 10.7498/aps.62.197302

1 引言

近年来, 低维半导体系统由于其独特的物理性质以及在电子和光电子器件中的应用, 引起了广泛的研究. 由于低维结构中的极化子问题比较复杂^[1-3], 许多理论模型被用于解决这个问题, 与其他方法相比较, 由 He^[4,5] 提出的并由 Mathieu 等^[6] 发展的分数维方法, 可以避免繁杂的计算并能够获得很好的结果, 成功的解决了低维半导体结构中诸如激子^[7-10]、极化子^[11-16]、杂质态^[17-21] 和双激子^[22-24] 等问题. 沉积在 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 衬底上的 GaAs 薄膜是一个重要的低维半导体异质结构, 同其他低维结构一样, 薄膜结构中的电子与声子的相互作用导致了极化子效应, 影响着此类弱极性半导体低维结构中电子和光电子的输运性质. 我们已用分数维方法研究了非对称方势阱中的激子与声子的相互作用^[25], 同时, 把分数维方法推广应用于 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 衬底上 GaAs 薄膜中极化子的结合能和质量变化随着膜厚和衬底厚度的变化关系^[26-28].

本文针对原有文献中在衬底势垒处有效量子限制长度发散的问题, 提出了确定 GaAs 薄膜的有效量子限制长度的新方法, 用分数维方法研究

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 衬底上 GaAs 薄膜中的极化子特性.

2 分数维方法

本文所研究的结构是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 衬底上的 GaAs 薄膜结构, 如果不考虑电子从结构中逃逸出来的情况, 结构中电子的势能函数可以表示为

$$V(z) = \begin{cases} V_w (= 0), & 0 \leq z \leq L_w, \\ V_b, & L_w < z \leq L_w + L_b, \\ \infty, & z < 0, z > L_w + L_b, \end{cases} \quad (1)$$

式中的下标“w”和“b”分别代表 GaAs 薄膜和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 衬底, L_w 代表薄膜厚度, L_b 为衬底厚度, 结构的势能函数可以表示为图 1.

在上述薄膜系统中, 本征波函数和本征能量满足薛定谔方程

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

式中

$$m(z) = \begin{cases} m_w, & 0 \leq z \leq L_w, \\ m_b, & L_w < z < L_w + L_b \end{cases}$$

为电子在 z 方向上的有效质量.

* 国家自然科学基金(批准号: 10574011, 10974017)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: tianqiangbnu@126.com

下面我们回顾一下分数维方法. 由二阶微扰理论^[11-14]得到, 考虑电子与 LO 声子弱耦合的情况下, 在维数为 D 的空间中, 极化子结合能和有效质量分别表示为

$$\Delta E = \alpha \hbar \omega_{LO} G_1(D), \quad (3)$$

$$m^* = \frac{m}{1 - \alpha G_2(D)}. \quad (4)$$

(3) 和 (4) 式中 α 为 Fröhlich 常数, ω_{LO} 为非色散近似下 LO 声子的频率, m 是电子的有效质量, 函数 $G_1(D)$ 和 $G_2(D)$ 分别为

$$G_1(D) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma[(D-1)/2]}{2 \Gamma[D/2]},$$

$$G_2(D) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma[(D-1)/2]}{4 D \Gamma[D/2]}, \quad (5)$$

(5) 式中 $\Gamma(x)$ 为 Gamma 函数.

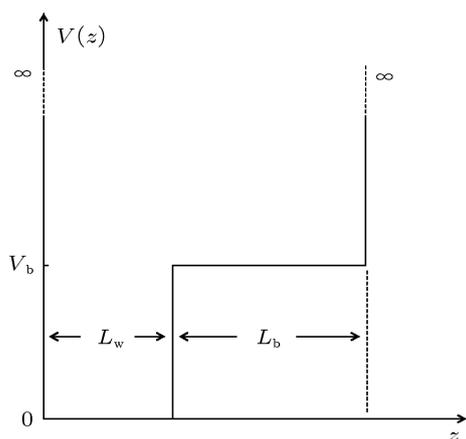


图1 Al_xGa_{1-x}As 衬底上的 GaAs 薄膜结构的势能函数示意图

从上面的式子可以看出, 如果我们得到维数, 那么极化子结合能和有效质量等物理量都能得到. 下面我们讨论维数 D 的定义.

量子结构的维数 D 表示为^[6,11-14]

$$D = 3 - \exp[-\xi], \quad (6)$$

式中

$$\xi = \frac{\text{有效量子限制长度}}{\text{相互作用的有效特征长度}},$$

在 GaAs 薄膜中, 电子-LO 声子的相互作用有效特征长度可以取为极化子直径, 即 $2R_p = 2 \times \sqrt{\hbar/2m\omega_{LO}}$, 而有效量子限制长度可以取为结构中电子波函数的有效扩展范围.

对于本文所考虑的薄膜系统, 电子在势阱 GaAs 与势垒 Al_xGa_{1-x}As 中都有一定的概率分布,

所以 (4) 式中的 m 应取为薄膜与衬底的相应参量的平均值^[13], 即

$$m^{-1} = \sum_{i=w,b} \frac{P_i}{m_i}, \quad (7)$$

式中 P_i 为不同材料中电子的概率, 与本征函数的关系为

$$P_w = \int_0^{L_w} |\Psi(z)|^2 dz,$$

$$P_b = 1 - P_w. \quad (8)$$

其他的材料参量也应取为薄膜与衬底的相应参量的平均值, 即

$$\omega_{LO} = \sum_{i=w,b} \omega_i P_i, \quad (9)$$

$$\alpha = \left[\sum_{i=w,b} \left(P_i \frac{\omega_i}{\omega_{LO}} \sqrt{\alpha_i \sqrt{\frac{m\omega_{LO}}{m_i \omega_i}}} \right) \right]^2, \quad (10)$$

$$R_p = \left[\sum_{i=w,b} \left(P_i \frac{\omega_i}{\omega_{LO}} \sqrt{\frac{\alpha_i R_{pi}}{\alpha}} \right) \right]^2, \quad (11)$$

(11) 式中 $R_{pi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_i \omega_i}}$.

3 对有效量子限制长度的讨论

由 (6) 式可以看出, 电子的有效量子限制长度的定义对维数 D 有很大的影响, 许多文献把有效量子限制长度表示为^[6,11-14]

$$L_w^* = L_w + \frac{1}{k_b}, \quad (12)$$

式中 k_b 是势垒即衬底中电子的波矢. 通过求解薛定谔方程式 (2), 可以得到波矢

$$k_b = \frac{\sqrt{2m_b(V_b - E)}}{\hbar}. \quad (13)$$

利用前面所得的式子, 我们数值计算了如 (12) 式定义的有效量子限制长度下, GaAs 薄膜中极化子的维数和结合能, 计算时 Al 的含量 x 取为 0.3, 势垒宽度 L_b 固定为 2 nm, 而势阱宽度 L_w 从 0.1 nm 变化到 20 nm, 如图 2 和图 3 中的虚线所示. 图 2 中的虚线显示了在势阱宽度 $L_w = 3.6$ nm 附近, 维数出现跳变, 这和由 (13) 式所表示的波矢相关, 可以看出, 如果电子的本征能量 E 和势垒高度 V_b 相近时, k_b 很小, 此时 $1/k_b$ 变得很大, 这将导致 (12) 式所表示的有效量子限制长度变得很大, 因而出现了跳变情况. 由于维数 D 出现的跳变, 导致了薄膜中极化子的结合能也出现了相应的跳变, 如图 3 中的虚线所示.

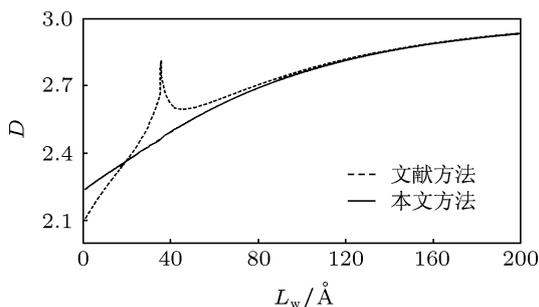


图2 用两种方法计算的 GaAs 薄膜系统的分数

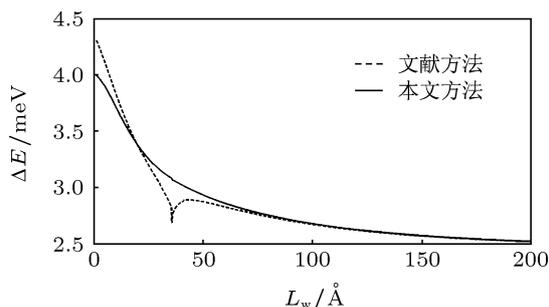


图3 用两种方法计算的 GaAs 薄膜系统中极化子的结合

在势阱宽度的变化范围内, 系统的维数变化应该是单调变化的, 因而不应该出现跳变的情况, 为解决维数跳变这个问题, 我们提出用结构的等效宽度作为电子的有效量子限制长度, 在这里, 等效宽度被定义为当实际结构中电子的能级 E 与宽度为 a 的无限深势阱的能级相等, 此时等效宽度 a 即为实际结构中电子的有效量子限制长度, 可以用以下式子表示:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (14)$$

通过解薛定谔方程 (2) 可得到本征能量 E , 由 (14) 式计算出相应的阱宽 a , 即得到有效量子限制长度 $L_w^* = a$. 我们可以直接验证一下 (14) 式的合理性: 当图 1 中的势垒材料的高度为 0, 即整个系统的能级和宽度为 $L_w + L_b$ 的无限深势阱一样, 即电子运动的受限宽度为 $L_w + L_b$; 而当势垒材料的势高为无

穷时, 系统的能级与宽度为 L_w 的无限深势阱相同, 电子的有效量子限制长度为 L_w ; 当势垒高度介于 0 和无穷之间, 有效量子限制长度介于 L_w 和 $L_w + L_b$ 之间. 基于上面的讨论, 用 (14) 式计算有限量子限制长度比半定量的定义 (12) 式更恰当. 用 (14) 式代替 (12) 式计算所得的结果显示为图 2 和图 3 中的实线. 由图可以看出, 在势阱宽度的变化范围内, 系统的维数变化是单调变化的, 没有出现跳变的情况, 这也符合物理实际, 因为势阱宽度的变化对电子的有效量子限制长度的影响应该是单调的.

4 结论

本文提出了确定 GaAs 薄膜的有效量子限制长度的一种新方法, 采用分数维方法, 计算了 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 衬底上 GaAs 薄膜中极化子的分数维和结合能随薄膜厚度的变化, 解决了由原文献所定义的量子限制长度所带来的维数跳变不连续问题. 沿用三明治结构中有效量子限制长度的取法 (见 (12) 式定义的有效量子限制长度), 在薄膜厚度变化的过程中维数会出现跳变情况, 原因是由于在电子的本征能量与势垒高度相近时, 衬底中电子的波矢 k_b 为零, 其倒数为无限大. 为避免这个问题, 我们把整个系统的本征能量等效于一个无限深势阱的能量, 此时无限深势阱的宽度即为电子的有效量子限制长度. 计算结果显示, 两种方法在势阱较宽时系统的维数和极化子的结合能非常接近, 但是用本文新的定义方式不会出现跳变情况. 对于薄膜中极化子的研究, 分数维方法是一个相对简单并可行的方法, 但是, 薄膜中的极化子问题不同于三明治结构中的, 本文仅从电子的有效量子限制长度的不同定义, 计算了薄膜中极化子特性随薄膜厚度的变化, 这对于薄膜电子和光电子器件具有一定参考价值.

[1] Yu Y F, Xiao J L, Yin J W, Wang Z W 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2236
 [2] Zhao F Q, Zhou B Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4856 (in Chinese) [赵凤岐, 周炳卿 2007 物理学报 **56** 4856]
 [3] Wang Z P, Liang X X 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 2367
 [4] He X F 1990 *Phys. Rev. B* **42** 11751
 [5] He X F 1991 *Phys. Rev. B* **43** 2063
 [6] Mathieu H, Lefebvre P, Christol P 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4092
 [7] Lefebvre P, Christol P, Mathieu H 1992 *Phys. Rev. B* **46** 13603
 [8] Christol P, Lefebvre P, Mathieu H 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 5626
 [9] Matos-Abiague A, Oliveira L E, de Dios-Leyva M 1998 *Phys. Rev. B*

58 4072
 [10] Wang Z P, Liang X X 2009 *Physics Letters A* **373** 2596
 [11] Matos-Abiague A 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 4543
 [12] Matos-Abiague A 2002 *Semicond. Sci. Technol.* **17** 150
 [13] Matos-Abiague A 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165321
 [14] Rodríguez Suárez R L, Matos-Abiague A 2003 *Physica E* **18** 485
 [15] Thilagam A, Matos-Abiague A 2004 *J. Phys.: Condens. Matter* **16** 3981
 [16] Wang Z P, Liang X X, Wang X 2007 *Eur. Phys. J. B* **59** 41
 [17] de Dios-Leyva M, Bruno-Alfonso A, Matos-Abiague A, Oliveira L E

- 1997 *J. Phys.: Condens. Matter* **9** 8477
- [18] Reyes-Gómez E, Perdomo-Leiva C A, Oliveira L E, de Dios-Leyva M 2000 *Physica E* **8** 239
- [19] Mikhailov I D, Betancur F J, Escorcía R A, Sierra-Ortega J 2003 *Phys. Rev. B* **67** 115317
- [20] Kundrotas J, Čerškus A, Ašmontas S, Valušis G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 235322
- [21] Kundrotas J, Čerškus A, Ašmontas S, Valušis G, Halsall M P, Johannessen E, Harrison P 2007 *Semicond. Sci. Technol.* **22** 1070
- [22] Ronnow T F, Pedersen T G, Partoens B 2012 *Phys. Rev. B* **85** 045412
- [23] Thilagam A 1997 *Phys. Rev. B* **55** 7804
- [24] Wang Z P, Liang X X 2010 *Solid State Commun.* **150** 356
- [25] Deng Y P, Lv B B, Tian Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4961 (in Chinese) [邓艳平, 吕彬彬, 田强 2010 物理学报 **59** 4961]
- [26] Wu Z H, Li H, Yan L X, Liu B C, Tian Q 2013 *Physica B* **410** 28
- [27] Wu Z H, Li H, Yan L X, Liu B C, Tian Q 2013 *Superlattices and Microstructures* **55** 16
- [28] Wu Z H, Li H, Yan L X, Liu B C, Tian Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 097302 (in Chinese) [武振华, 李华, 严亮星, 刘炳灿, 田强 2013 物理学报 **62** 097302]

Effective length of quantum confinement and polaron effect in a GaAs film*

Liu Bing-Can¹⁾ Li Hua¹⁾ Yan Liang-Xing²⁾ Sun Hui²⁾ Tian Qiang^{2)†}

1) (Department of Fundamental Courses, Academy of Armored Force Engineering, Beijing 100072, China)

2) (Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

(Received 18 May 2013; revised manuscript received 21 June 2013)

Abstract

The polaron confined in a GaAs film deposited on $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ substrate are investigated in the framework of the fractional-dimensional space approach. We propose a new approach to define the effective length of quantum confinement. Limitations of the definition of original effective well width are discussed. The dimension and the binding energy of a polaron confined in a GaAs film deposited on $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ substrate are obtained and investigated.

Keywords: fractional-dimensional approach, polaron, GaAs film

PACS: 73.61.-r, 73.90.+f

DOI: 10.7498/aps.62.197302

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10574011, 10974017).

† Corresponding author. E-mail: tianqiangbnu@126.com