

应变量子阱能带结构数值分析

华玲玲¹, 杨阳²

1. 华北科技学院基础部, 北京 101601
2. 华北科技学院计算机学院, 北京 101601

摘要 以 InGaAs/GaAs 应变量子阱材料为例, 讨论了量子阱结构中的应变效应, 用 $k \cdot p$ 微扰理论给出包括重空穴带、轻空穴带和自旋-轨道分裂带相互作用和考虑应变作用的 6×6 Luttinger-Kohn 哈密顿量, 利用 Matlab 精确求解, 并进行数值模拟得到了布里渊区中心的导带结构、价带结构和包络函数。结果表明, 应变的引入使晶体产生畸变, 改变了晶体结构的对称性, 进而改变了材料的能带结构, 提供了一种有效的能带裁剪手段。特点是将带隙、带边偏置比和能带结构计算系统结合起来, 构成一个完整体系, 该模型同样适用于其他 III-V 族的半导体量子阱的能带结构。

关键词 能带结构; 应变量子阱; 6×6 Luttinger-Kohn 哈密顿量; Matlab

中图分类号 O417

文献标志码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2013.17.005

Numerical Analysis on the Band Structure of Strained Quantum Wells

HUA Lingling¹, YANG Yang²

1. Basis Department, North China Institute of Science and Technology, Beijing 101601, China
2. Computer Department, North China Institute of Science and Technology, Beijing 101601, China

Abstract Taking strained quantum wells of InGaAs/GaAs as an example, the strain effect in the quantum well structure is discussed. Based on the $k \cdot p$ perturbation theory, the 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonian which include the heavy hole band, light hole band, the split-orbit splitting band mixing effect and strain effect is given. The 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonian is exactly calculated by using Matlab, with the numerical simulation, the conduction band structure, the valence band structure, and the envelope function at the center on Brillouin zone are obtained. The results indicate that introducing the strain makes the crystal distort, the symmetry of the crystal structure change, and furthermore the band structure of the material change, providing an effective band cutting tool. The research work is characterized as follows: a complete system model which considers all the effects, involving the band-gap, the band offset, and the band structure, is establish. The model is also suitable to calculation the band structures of other III-V family semiconductor quantum wells.

Keywords band structure; strained quantum well; 6×6 Luttinger-Kohn Hamiltonian; Matlab

0 引言

能带理论在能带工程研究中非常重要, 因为材料体系多种多样, 通过能带理论可以发现具有新物理现象的结构, 有时这些现象具有很大的工程应用价值。量子阱材料的出现大大促进了光电器件的发展, 能带理论可以在材料和结构设计中充分发挥作用, 人们可以通过选择阱宽、阱深、垒高、垒厚、引入应变等自由地对量子阱的能带结构进行调整。尤其是应变效应的引入提供了一种有效的能带裁剪手段, 不但能实现按需求剪裁量子阱的能带结构, 而且增加了势阱、势垒材料的选择和自由度, 使人们制作出性能更优越的器件。

许多方法可以用来计算能带结构, 如正交化平面波方法、紧束缚方法、经验势法、第一原理法^[1]、 $k \cdot p$ 微扰法^[2]等。其中 $k \cdot p$ 微扰法是利用微扰理论并结合晶体对称性研究波函数, 获得在 k 空间某些特殊对称点附近的能带结构。这种方法是利用实验得到的有限参数, 如带隙能、有效质量、带边能量、形变势等, 确定能带结构公式中的待定系数, 从而确定能带结构表达式。 $k \cdot p$ 微扰法的主要特点在于它相对简单, 结果准确, 并且很容易应用到量子阱、多量子阱、超晶格及应变材料等复杂结构的计算中。虽然只能用于考虑布里渊区中心的能带, 但半导体的载流子(包括电子和空穴)分布在导带底

收稿日期: 2013-02-22; 修回日期: 2013-03-13

基金项目: 中央高校基本科研业务费项目(3142011013); 华北科技学院教育科学研究基金项目

作者简介: 华玲玲, 讲师, 研究方向为光泵半导体激光器, 电子信箱: your2008@vip.163.com

或者价带顶附近很小的范围内,因此半导体材料的光学性质主要由这部分电子决定。所以 $k \cdot p$ 微扰法是目前分析计算半导体能带理论最常用的方法。

本文以目前研究最为广泛的 InGaAs/GaAs 应变量子阱系统为例,讨论了量子阱结构中的应变效应,给出了包括重空穴带(HH)、轻空穴带(LH)和自旋-轨道分裂带(SO)相互作用和考虑应变作用的 6×6 Luttinger-Kohn 哈密顿量^[3],利用 Matlab 精确计算并模拟了 InGaAs/GaAs 应变量子阱布里渊区中心附近的导带、价带的能带结构和包络函数。

1 应变对量子阱能带结构的影响

1.1 应变效应

在外延生长量子阱时,如果外延层与基质材料的晶格常数不匹配,则将在外延层中引入应变,形成所谓应变量子阱。应变附加的势能会使能带边发生移动,改变材料带隙能,并使原来在价带顶简并的重空穴和轻空穴退简并。其次,应变会使能带结构发生变形,最重要的应变效应是使价带曲率半径增大,即空穴的有效质量减小。改变原来电子有效质量大大小于空穴有效质量的情形,使导带与价带的平衡得到改善,准费米能级的配置近于对称,从而在同一带间产生准费米能级差所需的载流子密度减小。量子阱的应变类型有压应变和张应变两种,如图 1 所示,当势阱的晶格常数比势垒的晶格常数大时,成为具有压应变的应变量子阱;与此相反,成为具有张应变的应变量子阱。压应变时空穴带上升,位于轻空穴带之上,电子-重空穴间(E-HH)跃迁成为主要跃迁;而在张应变时,情况则刚好相反,轻空穴带位于重空穴带之上,电子-轻空穴间(E-LH)跃迁成为主要跃迁。应变使得晶体产生畸变,改变了晶体的对称性,进而使材料的能带结构发生了变化。

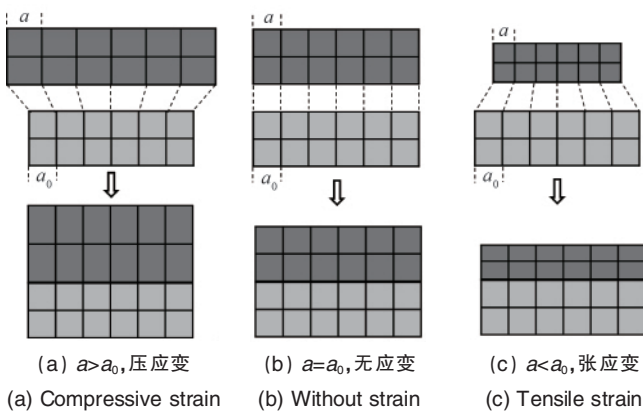


图 1 沿基质(001)方向生长的应变层示意

Fig. 1 Scheme of the strained layers growing along the (001) direction of the substrate

1.2 应变对能带带边的作用

应变对导带边的作用是产生一个流体静压形变能 P_{ce} ,其满足^[3,4]

$$P_{ce} = a_c(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) = 2a_c \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon \quad (1)$$

其中, C_{11} 和 C_{12} 为材料的弹性常数; a_c 为导电流体静压形变势。

应变引起的价带漂移有两个分量,一部分是流体静压形变能 P_e ,作用是使整个价带上升或下降,影响到整个应变层的带隙宽度;另一部分是四角形剪切形变能 Q_e ,作用是使轻重空穴带向相反的方向移动,即退简并。它们各自满足

$$P_e = -a_v(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) = -2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon \quad (2)$$

$$Q_e = -\frac{b}{2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz}) = -b \left(1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon \quad (3)$$

这里应变张量 ϵ_j 分别定义为

$$\epsilon = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_0 - a(x)}{a(x)} \quad \epsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \epsilon \quad \epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0 \quad (4)$$

选择晶体生长面的方向(001)为 z 轴, a_0 是衬底 GaAs 的晶格常数, $a(x)$ 是外延层 InGaAs 的晶格常数。 a_v 为价带的流体静压形变势, b 为剪切形变势。

1.3 带边偏置比

量子阱的带边偏置,是指在两种不同材料构成的异质结界面上,两个禁带宽度之差的分配问题。令量子阱和势垒的带隙能量分别为 E_g^w 和 E_g^b , 其差为 $\Delta E_g = E_g^b - E_g^w$, 则 ΔE_c 和 ΔE_v 分别表示 ΔE_g 分配给导带下端和价带上端电势带阶。

$$\Delta E_c = E_c^b - E_c^w \quad (5)$$

$$\Delta E_v = E_v^w - E_v^b \quad E_v = \begin{cases} E_{HH} \\ E_{LH} \end{cases} \quad (6)$$

对于压应变 E_{HH} ,重空穴位于轻空穴之上,成为价带顶,故取 $E_v = E_{HH}$;而对于张应变 E_{LH} ,情况刚好相反,轻空穴位于重空穴之上,成为价带顶,应取 $E_v = E_{LH}$ 。

导带和价带的带边偏置比分别表示为

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_g} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (7)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_g} = 1 - Q_c \quad (8)$$

其中, $E_v^w, E_c^w, E_v^b, E_c^b$ 分别为阱和垒的价带和导带位置。

2 能带结构

2.1 导带结构

量子阱能带结构的计算实际上是分别解导带中电子和价带中空穴的薛定谔方程,得到对应能量本征值和包络函数的过程。对于导带中的电子,一般采用抛物线近似,即可得到较为理想的结果。导带电子的哈密顿量可表示为^[5,6]

$$H^c(\mathbf{k}) = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) \left(\frac{k_x^2}{m_e^*} + \frac{k_y^2}{m_e^*}\right) + V_c(z) + P_{ce} \quad (9)$$

其中, \mathbf{k} 为波矢, k_x, k_y, k_z 为波矢分量, $k_i = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = -i \nabla_i, k_z = -i \partial / \partial z; m_e^*$ 和 m_c^* 分别是电子横向和纵向的有效质量; \hbar 为约化普朗克常数; $V_c(z)$ 是没有应变的导带势能。导带结构 $E_n^c(k_i)$ 可由下式确定:

$$H^c \varphi_n(z) = E_n^c \varphi_n(z) \quad (10)$$

解方程时可先取 $k_x=0$, 然后求解得 $E_n^c(k_x=0)$ 。则整个导带结构可表示为

$$E_n^c(k_x) \approx E_n^c(k_x=0) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} \quad (11)$$

$E_n^c(k_x=0)$ 为量子化能量, $\hbar^2 k_x^2 / 2m_e^*$ 为电子抛物线能量分布。可证明导带包络函数有 $\varphi_n(z, k_x) = \varphi_n(z, k_x=0) = \varphi_n(z)$ 。

2.2 价带结构

应变量子阱价带哈密顿量是由 $k \cdot p$ 微扰理论得到的一个 6×6 矩阵, 不仅包括重空穴带、轻空穴带, 还包括自旋轨道分裂矩带的相互作用。通过么正变换, 该 6×6 矩阵对角化, 形成两个 3×3 矩阵。如果研究的量子阱结构是对称的, 则可以只解含一个 3×3 矩阵哈密顿量的方程。下面给出的是考虑应变作用, 经过么正变换后的 6×6 块对角哈密顿量^{5,6)}

$$H_{6 \times 6} = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix} \quad (12)$$

其中, H^U 和 H^L 均是 3×3 矩阵, 定义为

$$H_{3 \times 3}^{\sigma} = \begin{bmatrix} P+Q-V_h(z) & R_k \mp i S_k & \sqrt{2} R_k \pm \frac{i}{\sqrt{2}} S_k \\ R_k \pm i S_k & P-Q-V_h(z) & \sqrt{2} Q \pm i \sqrt{\frac{3}{2}} S_k \\ \sqrt{2} R_k \mp \frac{i}{\sqrt{2}} S_k & \sqrt{2} Q \mp i \sqrt{\frac{3}{2}} S_k & P+\Delta(z)-V_h(z) \end{bmatrix} \quad (13)$$

其中, $\sigma=U$ 或 L , 分别表示上哈密顿算符和下哈密顿算符。 $H^U=(H^L)^*=(H^L)^T$ 。矩阵元中包括了有应变存在的情况。其中

$$P=P_k+P_e, Q=Q_k+Q_e$$

$$P_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_1 (k_x^2 + k_z^2) \quad Q_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_2 (k_x^2 - 2k_z^2) \quad (14)$$

$$R_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) k_x^2 \quad S_k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) 2\sqrt{3} \gamma_3 k_x k_z$$

其中, m_0 为自由电子质量; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 是材料的 Luttinger 有效质量参数; $\Delta(z)$ 为自旋-轨道耦合分离能; $V_h(z)$ 是带边偏置确定的无应变时价带势能, 且满足 $V_e(z) = V_h(z) + E_g$ 。计算中令无应变时阱区的价带边 $V_h(z) = 0$ 。

对于上哈密顿算符, 价带子带结构能量本征值 $E_m^U(k_x)$ 可由下式确定:

$$\sum_{j=1}^3 H_{3 \times 3, ij}^U(k_x = -i\partial/\partial z) g_m^j(z, k_x) = E_m^U(k_x) g_m^i(z, k_x) \quad (15)$$

其中 $i=1, 2, 3$ (分别代表重空穴带(HH)、轻空穴带(LH)、自旋-轨道分裂带(SO))。 H^U 和 H^L 具有相同的价带结构, $E_m^U(k_x) = E_m^L(k_x)$ 。量子阱结构是对称的, 因此只解含一个 3×3 矩阵哈密顿量的方程即可得到价带结构图。

对于三元合金 $P(AB_xC_{1-x})$, 各参数由二元合金 AB 和 AC 的相应参数通过插值得到

$$P(AB_xC_{1-x}) = xP(AB) + (1-x)P(AC) - x(1-x)b_{ABC} \quad (16)$$

如果三元合金由两种晶格常数不匹配的二元材料组成, 则其中一种材料应视为被拉伸, 而另一种材料视为被压缩, 所以式(16)中引入合金 ABC 的弯曲参数 b_{ABC} , 反映插值对线性的偏离程度。InGaAs 三元材料的非零弯曲参数^{7,8)}为 $b_{Bg} = 0.477, b_{\Delta} = 0.15, b_{a_c} = 2.61, b_{m_c} = 0.0091$ 。本文计算中取 In 组分含量 $x=0.19$, 固定阱宽 $L_w=8\text{nm}$, 势垒宽度 $L_0=16\text{nm}$, 温度 $T=300\text{K}$ 。所用二元材料的材料参数见表 1⁷⁻⁹⁾。

表 1 数值模拟所用材料参数

Table 1 Material Parameters for numerical simulation

材料	$a/\text{\AA}$	$C_{11}/(10^6\text{N}\cdot\text{cm}^{-2})$	$C_{12}/(10^6\text{N}\cdot\text{cm}^{-2})$	a_e/eV	a_v/eV	b/eV	m_e/m_0	γ_1	γ_2	γ_3	$\Delta(z)/\text{eV}$
GaAs	5.65325	12.21	5.66	-7.17	1.16	-2.0	0.067	6.98	2.06	2.93	0.34
InAs	6.0583	8.329	4.526	-5.08	1.00	-1.8	0.026	20.0	8.5	9.2	0.39

3 模拟结果分析与讨论

图 2 是考虑价带混合效应由上哈密顿量计算所得的 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$ 应变量子阱导带和价带沿 k_x 方向的分布图。由图 2 可以看出, 导带结构较简单, 在量子效应的影响下, 只是产生量子化能级, 且在量子阱的约束范围内, 导带只有一个能级 C1, 仍是抛物线型分布, 电子的有效质量不变。价带结构较为复杂, 可以看出各子带的分布显著偏离抛物线型, 这是由价带中轻重空穴带混合所致。由图可见在量子阱的约束范围内, 价带分裂为 4 个能级, 除重空穴带 HH1、HH2 和 HH3 之外出现了第一轻空穴带(LH1)。由于 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$ 量子阱材料因晶格失配产生的应变始终为压应变, 所以压应变使能隙增加和布里渊区中心价带边分裂, 使重空穴带向上

移动而轻空穴带向下移动, 其结果使重空穴带分裂增大。自旋-轨道分裂值很大, 在 $k_x=0$ 附近, 自旋-轨道耦合带与轻重空穴带的距离很大, 它对轻、重空穴的影响很小。第一重空穴带(HH1)随着压应变上升形状变陡, 态密度变小。这种压应变引起的价带劈裂使 HH1 的有效质量减小, 变得与导带 C1 更为接近。

图 3 所示为导带在 $k_x=0$ 时的包络函数图。图 4 表示 $k_x=0.03(10^{10}\text{m}^{-1})$ 时, $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$ 应变量子阱价带包络函数图。其中图 4(a) 表示上哈密顿量 H^U 的包络函数, 图 4(b) 表示下哈密顿量 H^L 的包络函数。可以看出, H^U 和 H^L 是对称的, 因此 $g_m^{(1)}(z; k_x) = g_m^{(4)}(-z; k_x), g_m^{(2)}(z; k_x) = g_m^{(5)}(-z; k_x), g_m^{(3)}(z; k_x) = g_m^{(6)}(-z; k_x)$ 。

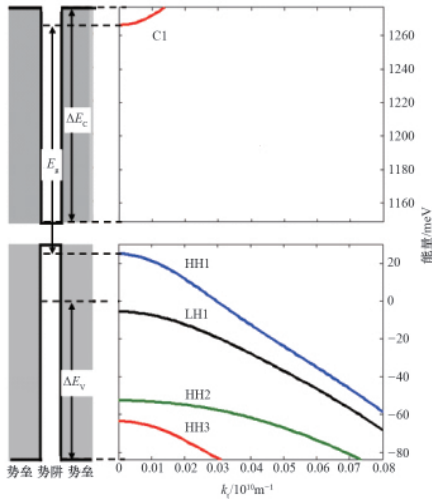
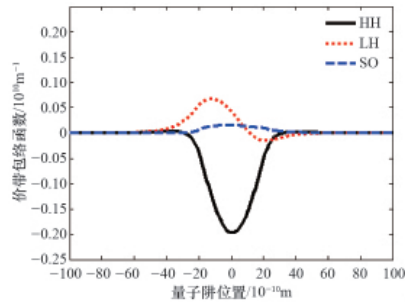


图 2 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$ 量子阱能带 ($L_w=8\text{nm}$, $T=300\text{K}$)
Fig. 2 Band structures of the quantum wells of $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$ ($L_w=8\text{nm}$, $T=300\text{K}$)



(a) 上哈密顿量 H^U
(a) Up Hamiltonian H^U

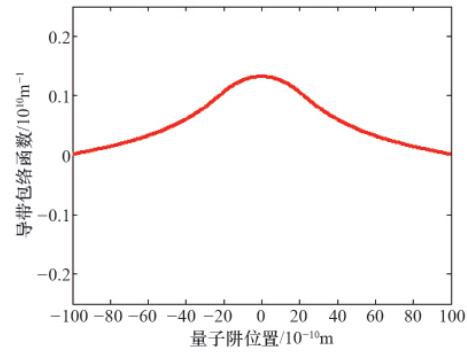
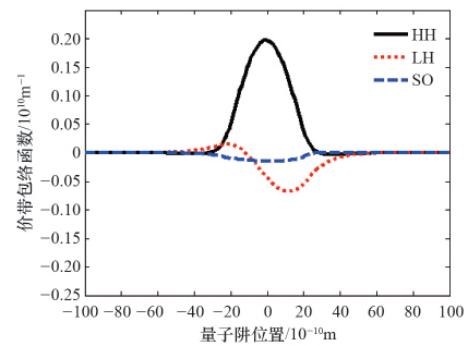


图 3 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$ 应变量子阱导带包络函数
Fig. 3 Envelope function of the conduction band for the strained quantum well of $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$



(b) 下哈密顿量 H^L
(b) Down Hamiltonian H^L

图 4 $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$ 应变量子阱价带包络函数

Fig. 4 Envelope functions of the valence band for the strained quantum well of $\text{In}_{0.19}\text{Ga}_{0.81}\text{As}/\text{GaAs}$

4 结论

本文以 $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ 应变量子阱为例,利用 Matlab 对含 Luttinger-Kohn 哈密顿量的有效质量方程精确求解,得到了 $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ 应变量子阱导带、价带的能带结构和包络函数。通过数值模拟分析可知,压应变量子阱结构,导带向上漂移,价带向下漂移,有源区的禁带宽度比无应变时的禁带宽度要宽,它改变了传统无应变轻的导带有效质量与非常重的价带有效质量之间的巨大不对称性,从而更有利于提高半导体器件的性能。这对进一步研究应变量子阱的结构设计提供了有效的理论依据。

参考文献 (References)

[1] 徐光宪,黎乐民.量子化学:基本原理和从头计算法[M].北京:科学出版社,1980.
Xu Guangxian, Li Lemin. Quantum chemistry: basic principle and ab initio calculation method[M]. Beijing: Science Press, 1980.
[2] 谢希德,陆栋.固体能带理论[M].上海:复旦大学出版社,2000.
Xie Xide, Lu Dong. Band theory of solid[M]. Shanghai: Fudan University Press, 2000.
[3] Chang C S, Chuang S L. Modeling of strained quantum-well lasers with

spin-orbit coupling [J]. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 1995, 1(2): 218-229.
[4] Chuang S L, Chang C S. A band-structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors[J]. Semiconductor Science and Technology, 1997, 12(3): 252-263.
[5] 华玲玲,宋晏蓉,张鹏,等.光抽运半导体激光器增益特性研究[J].光学学报,2010,30(6):1702-1708.
Hua Lingling, Song Yanrong, Zhang Peng, et al. Acta Optica Sinica, 2010, 30(6): 1702-1708.
[6] Zhang P, Song Y R, Tian J R, et al. Gain characteristics of the InGaAs strained quantum wells with GaAs , AlGaAs , and GaAsP barriers in vertical-external-cavity surface-emitting lasers [J]. Journal of Applied Physics, 2009, 105(5): 053103.
[7] 宋晏蓉,华玲玲,张鹏,等. $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ 应变量子阱能带结构的计算[J].北京工业大学学报,2011,37(4):565-569.
Song Yanrong, Hua Lingling, Zhang Peng, et al. Journal of Beijing University of Technology, 2011, 37(4): 565-569.
[8] Vurgaftman I, Meyer J R, Ram-Mohan L R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys [J]. Journal of Applied Physics, 2001, 98(11): 5815-5875.
[9] Pipek J. Semiconductor optoelectronic devices introduction to physics and simulation[M]. Salt Lake City: Academic Press, 2003: 18-47.

(责任编辑 刘志远)