

学校编号: 10384

分类号____密级____

学号: 9824008

UDC_____

厦 门 大 学 硕 士 学 位 论 文

异质结带阶计算简化模型及应用与磁场下单量子阱中电子的能带结构

廖任远

指导教师: 蔡淑惠 副教授

专业名称: 凝聚态物理

学位级别: 硕士

论文提交日期: 2001 年 4 月

论文答辩日期: 2001 年 月

学位授予单位和日期: 厦门大学, 2001 年 月

答辩委员会主席:

评阅人:

2001 年 4 月

**Simplified model of calculating heterojunction band offset
and its applications and electronic band structure of
quantum well in magnetic field**

Thesis for MS.

By **Liao Renyuan**

Supervisor: **Associate Professor Cai Shuhui**

Department of Physics, Xiamen University,

People's Republic of China, April 2001

目 录

中文摘要.....	1
英文摘要.....	3
序 言.....	5
第 1 章 半导体异质结及其带阶.....	7
§ 1.1 异质结的研究概况.....	7
§ 1.2 异质结的能带结构.....	8
§ 1.3 影响异质结带阶的因素.....	9
§ 1.4 考虑电子交换后的异质结能带结构.....	10
§ 1.5 异质结在半导体器件中的应用.....	11
参 考 文 献.....	13
第 2 章 研究异质结带阶的理论及方法.....	15
§ 2.1 密度泛函理论.....	15
1. Hohenberg-Kohn 定理.....	15
2. Kohn-Sham 方程.....	17
3. 交换关联近似.....	19
4. 局域密度泛函理论的局限性与解决途径.....	19
§ 2.2 赝势能带计算方法.....	21
1. 赝势的导出.....	22
2. 经验赝势法.....	23
3. 模守恒赝势法.....	24

§ 2.3 形变势理论.....	27
1. 应变的描述.....	27
2. 应变对半导体能带的影响.....	29
参 考 文 献.....	37
第 3 章 异质结带阶计算的简化模型.....	39
§ 3.1 概述.....	39
§ 3.2 几种模型理论.....	39
§ 3.3 异质结带阶计算的简化模型.....	42
参 考 文 献.....	58
第 4 章 磁场下量子阱中电子的能带结构.....	61
§ 4.1 概述.....	61
§ 4.2 有效质量近似.....	61
§ 4.3 量子阱中的束缚量子态.....	63
§ 4.4 均匀磁场下量子阱中的量子态.....	65
§ 4.4 周期性磁场下 $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 单量子阱中的电子的能带结构.....	67
1. 介绍.....	67
2. 周期性磁场下电子的能带结构.....	67
3. 结论.....	72
参 考 文 献.....	73

异质结带阶计算简化模型及应用 与磁场下单量子阱中电子的能带结构

廖任远

厦门大学物理系 厦门 361005

摘要

本论文的工作可分两部分。第一部分是关于异质结带阶的研究。第二部分研究周期性磁场下单量子阱中电子的能带结构。

在带阶研究中,我们主要对应变层异质结的带阶进行研究。首先采用基于密度泛函理论框架下的模守恒赝势法计算得到体半导体材料的能带结构,接着我们把平均键能方法推广应用于应变层异质结的价带和导带带阶研究。通过平均带阶参数形变势 $a_{mv,av}$ 和 $c_{mv,av}$ 研究带阶参数 E_{mv} 随应变状态的变化关系,发现平均带阶参数 $E_{mv,av} = E_m - E_{v,av}$ 在不同应变状态下基本上保持不变,从而建立了异质结带阶计算的简化模型。这样,在应变层带阶参数 E_{mv} 的计算中,只需计算其应变前体材料的带阶参数 $E_{mv,0}$ 值并引用形变势 b 和 SO 裂距 Δ_0 的实验值,通过简便的代数运算即可得到应变层 E_{mv} ,从而方便地预测不同应变层异质结的价带带阶。通过引入带隙形变势 a_{Gap} 描述带阶改变量 ΔE_g 随应变状态的变化,结合导带带阶和价带带阶的关系 $\Delta E_c = \Delta E_g + \Delta E_v$ 可以求出不同应变情况下的导带带阶。通过对 Si/Ge、GaAs/InAs、AlAs/InAs、GaAs/InP 等几种常见的应变层异质结带阶进行计算,我们可以看到利用此简化模型的计算相当简单,得到的结果较好。

本文的第二部分着重研究周期性磁场下 $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 单量子阱中电子的能带。我们采用脉冲磁场,利用有效质量近似,对电子所处的势阱用方阱势近似,从而得

到量子阱中电子的薛定谔方程。通过解析求解，得到量子阱中电子的能带结构。我们发现，在周期性磁场的作用下，在 z 方向上的能量是分立的量子化能级，而原来在 x - y 平面内连续的能级分裂成分立的一系列许可带，但是在 x 方向上能量仍然是连续的。我们对其能带的特点和形成机制进行了探讨。

关键词 异质结 带阶 能带结构

厦门大学博士论文摘要库

Abstract

This thesis consists of two parts. In the first part we studied band offsets of heterojunctions. In the second part the electronic band structure of single quantum well in periodic magnetic field was investigated.

In the study of band offset, we focused our attention on the band offsets of strained-layer heterojunctions. Firstly, we made use of norm-conserving pseudopotentials within local-density-functional framework to calculate band structure of semiconductors. Then we extended average-bond-energy method to study band offsets of strained-layer heterojunctions. Through a careful study of band offset parameter E_{mv} with deformation potential $a_{mv,av}$ and $c_{mv,av}$, we found that the average band offset parameter $E_{mv,av}$ ($E_{mv,av} = E_m - E_{v,av}$) is almost kept unchanged under different strain conditions. Based on the fact we built a simplified model to calculate band offset of heterojunctions easily. Using this model only the unstrained band offset parameter $E_{mv,0}$, deformation potential parameter b and the experimental value of spin-orbit splitting Δ_0 are necessary to obtain strained-layer band offset parameter E_{mv} by simple algebraic operations. Obviously, it will be very convenient for calculating band offset of strained-layer heterojunctions, since it doesn't need to consider the exact strain characteristics. In addition, we introduced deformation potential of band gap a_{Gap} to describe the change of band gap ΔE_g under different strain states. According to the relationship between conduction band offset and valence band offset ($\Delta E_c = \Delta E_g + \Delta E_v$), it is easy to calculate conduction band offsets of heterojunctions under different strain conditions. Our calculated band offsets of

several common strained-layer heterojunctions are fairly good compared to those obtained by CNL(charge neutrality level)or MST(model solid theory) method, and in good agreement with experimental data. To sum up, our method provides an effective and simple way to determine band offsets of strained-layer heterojunctions.

In the second part of the thesis we mainly studied the electronic band structure of $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ single quantum well in periodic magnetic field. To get schrodinger equation of electrons, pulse magnetic field and effective mass approximation were employed. The potential well was approximated by square well. By solving the equation, we obtained the electronic band structure of the single quantum well. It is found that under the periodic magnetic field, the energies of z direction are certain quantum energy steps, and the energies of x-y plane which are continuous originally are divided into various permissive bands, but the energies of x direction are still continuous. The characteristics of the electronic band structure and its formation mechanism was discussed.

Key words: heterojunction , band offset , energy band structure

序 言

异质结材料具有同质结材料所没有的诸多优点,并且由异质结构成的量子阱和超晶格具有许多特殊的性质,所以在理论研究中得到极大的关注,在实际中得到了广泛的应用。近年来,随着生长技术的发展,已能够生长具有较大应变的高质量异质结。带阶是决定异质结和超晶格的电学光学性质的一个重要参量,已经成为量子阱和超晶格能带工程的基础。理解限制带阶参量的因素和机制在科学研究和技术方面都是令人感兴趣的。而目前由实验测定带阶参量仍存在较大的困难。因此,采用理论方法研究带阶将弥补实验的不足,并可望用于指导设计新材料。对于带阶的理论研究,有两类方法。一类是自洽超原胞计算或自洽界面计算方法。目前,这是唯一能获得界面电子分布全图景的方法,因为它允许根据界面的特定环境对价带电子进行调节。该方法已经用于晶格匹配界面[1]及代表性的应变层界面[2]的计算并给出与实验值相当符合的结果[3]。遗憾的是,其计算复杂度很高,这就限制了它们在新异质结构的开拓及设计方面的应用。尤其对应变层的情形,对每个想象的应变组态进行自洽计算是不现实的。另一类是参考能级模型理论方法,如介电中性能级(DME)模型,模型固体理论(MS),电中性能级(CNP), Tersoff 和 Harrison 的紧束缚钉扎模型,以及我们提出的平均键能方法。在这些模型中,利用参考能级在异质界面处对齐,只需对两个体材料进行自洽计算,计算量较小,但是无法包含具体的界面效应。

由于目前对晶格失配界面的计算还较少,而现实中界面晶格失配的情况更常见,因此,建立能用于晶格匹配和失配界面计算的简化模型[4-10],使得通过简单的计算即可获得可靠的带阶参数将是非常有意义的。有鉴于此,本论文第一部分将在平均键能和形势理论的基础上提出一个计算应变异质结带阶的简化模型,并对一些常见应变层异质结进行计算。我们将看到,利用该模型,在应变异质结带阶计算中只需对未应变材料进行计算便可得到足够好的结果,从而能大大减少计算量。

对于量子阱和超晶格,不仅可以通过选择不同材料、控制掺杂以改变势阱形状等方法来控制材料的性质,而且可以通过外场来控制材料的性质。磁场对量子阱和超晶格的性质具有很大的影响。虽然人们对二维电子气在均匀磁场中的量子输运进行了大量的实

验和理论研究,但是由于实验条件等因素的限制,有关周期性磁场对量子阱中电子能带结构的影响的研究还较少,因此本论文第二部分对此进行了一些尝试。

本论文共分四章,前三章为第一部分,第四章是第二部分。

第一章主要是对异质结的一些重要性质进行阐述,系统介绍了异质结材料的优越性以及在实际中的广泛应用。本章强调了带阶是决定异质结性质的重要因素,并分析了影响异质结带阶的诸多因素。

在第二章中,我们详细描述了进行带阶理论研究的一些方法。由于本论文对电子结构的计算是采用基于局域密度泛函理论框架下的从头算赝势法,带阶计算简化模型是建立在平均键能和形变势的基础上的,因此本章对密度泛函理论、从头算赝势法、平均键能方法和形变势理论进行了系统的介绍。

在第三章,我们首先介绍了一些常用的模型理论,接着推导出带阶计算简化模型,在此基础上运用该模型对常见的一些应变层异质结带阶进行了计算,并对计算结果和该模型进行了分析和讨论。

第四章是本论文工作的第二部分。本章对磁场中量子阱的电子能带结构进行了详细的理论探讨,着重研究了周期性磁场下单量子阱中电子的能带结构,并讨论其形成机理。

参考文献:

- [1]C. G. Van de Walle, R. M. Martin. Phys. Rev. B, 35, 8154(1987)
- [2]C. G. Van de Walle, R. M. Martin, Phys. Rev. B, 34, 5621(1986)
- [3]W. L. Lambrecht, B. Segall, O.K. Andrson. Phys. Rev. B, 41, 2813(1990)
- [4]R. L. Anderson. Soild-State Electron, 5, 341(1962)
- [5]W. R. Frensley and H. Kroemer. Phys. Rev. B, 16, 2642(1977)
- [6]W. A. Harrison. J. Vac. Sci. Technol., B3(4), 1231(1985)
- [7]C. Tejedor, F. Flores. J. Phys. C, 11, L19(1978)
- [8]J. Tersoff. Phys. Rev. B, 30, 4874(1984)
- [9]C. G. Van de Walle, R. M. Martin. Phys. Rev. B, 35, 8154(1987)
- [10]A. Baldereschi, S. Baroni, R. Resta. Phys. Rev. Lett., 61, 734(1988)

第一章 半导体异质结及其带阶

1.1 异质结的研究概况

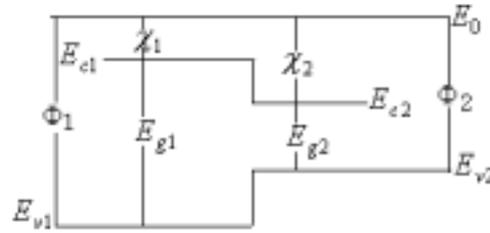
由两种不同的半导体单晶材料组成的结称为异质结。虽然早在 1951 年就已经提出了异质结的概念, 并进行了一定的理论分析研究[1,2], 但是由于工艺技术的困难, 一直没有制成异质结。自 1957 年克罗默[3]指出由导电类型相反的两种不同的半导体单晶材料制成的异质结, 比同质结具有更高的注入效率之后, 异质结的研究才比较广泛地受到重视。由于汽相外延生长技术的发展, 使异质结在 1960 年第一次制造成功[4]。1969 年发表了第一篇制成异质结莱塞二极管的报告[5,6], 此后异质结在电子学界及电子工程界受到更大的关注, 并得到了广泛的应用。例如, 室温注入激光器, 轻发射极二极管, 光探测器, 太阳能电池等。

早期由于外延技术不成熟, 因此在两种半导体的界面处, 常存在较高的缺陷, 这就限制了异质结在半导体工艺中的应用。20 世纪 70 年代以来, 随着外延技术的进步, 特别是分子束外延(molecular beam epitaxy, 简称 MBE)技术的应用, 可以在实验室中生长出晶格结构完整的异质结。异质结使半导体器件的性能得到很大的改善, 例如采用异质结可以制成高电子迁移率晶体管(HEMT), 使晶体管的高频性能得到很大程度的改善。利用异质结制成的激光器, 在各方面的性能也比普通的 PN 结激光器有较大的提高。如果在半导体衬底上相继生成两个异质结, 就可得到量子阱, 如果在半导体衬底上周期性地生长厚度极薄(小于电子的平均自由程)的两种不同半导体, 则可以得到另一种新的结构——超晶格。1970 年, 江崎和朱兆祥提出了超晶格的概念[7], 随后在理论和实验工作的推动下, 在器件中得到了巨大的应用, 出现了量子阱激光器, 光双稳器件, 光测器件, 共振隧穿器件, 垂直输运器件等。总之, 量子阱和超晶格为开拓新的半导体器件展示了美好的前景。

近年来, 半导体异质结和超晶格及它们在电子器件中的应用得到极大的发展。新生长技术的引入及改善使得生长极其高质量的外延层成为可能, 不仅可用于晶格匹配的半导体, 而且可用于晶格常数相差几个百分比的材料。“赝形”(pseudomorphic)界面的特点是在整个结构中平面晶格常数保持不变[8]。这些应变能导致电性质发生深远变化, 因此

在器件设计方面可提供更大的灵活性。

1.2 异质结的能带结构



图(1.1) 异质结能带结构示意图

当两块不同材料的不掺杂的本征半导体相互结合在一起时,由于不同半导体具有不同的亲和势及不同的禁带宽度,如果不考虑两边半导体间电子交换,界面附近的能带结构如图 1.1 [9],图中 E_0 代表真空能级,两种半导体的亲和势分别为 χ_1, χ_2 。从图 1.1 可以看到,在界面处导带及价带都发生了能带边的阶梯,常把此阶梯的大小称为带价。导带带阶可表示为 $\Delta E_c = \chi_2 - \chi_1$, 价带带阶可表示成 $\Delta E_v = (E_{g1} - E_{g2}) - \Delta E_c$ 。

如果把价带顶处的电子激发至真空能级 E_0 所需要的能量定义为该半导体的电离能 $\Phi = \chi + E_g$, 则价带带阶也可表示成 $\Delta E_v = \Phi_1 - \Phi_2$ 。由于各种半导体的亲和势及电离能可能相差很大,因此由不同半导体组成的异质结可以有非常不同的能带结构。原则上有图 1.2 所示的三种不同情况:

1. 一种半导体的禁带完全包含在另一种半导体的禁带之内,常称为跨立型(Straddling)。由 $GaAs$ 和 $Al_xGa_{1-x}As$ 所构成的异质结就属于这种类型。
2. 两种半导体的禁带相互错开,称为错开型(Staggered)。 $Ga_{1-x}In_xAs$ 和 $GaAs_{1-x}Sb_x$ 所构成的异质结属于这一类型。
3. 两种半导体的禁带没有共同的能量,一种半导体的价带顶处在另一种半导体的导带底之上,称为破隙型(broken gap)。由 $InAs$ 和 $GaSb$ 所构成的异质结就属于这一类。



图(1.2) 三种不同类型的异质结能带结构示意图

不同能带排列的异质结具有不同的物理性质。例如破隙型异质结，由于一种半导体的价带顶高于另一种半导体的导带底，因此在前一种半导体的价带中存在大量空穴而在后者的导带中存在大量电子，两者都具有导电能力，所以这种异质结具有半金属的性质。又如错开型异质结，由于一种半导体的导带底及价带顶分别高于另一种半导体的导带底和价带顶，因此导带电子将集中在能带边低的半导体中，而空穴将集中在能带边高的半导体中，这样电子和空穴在空间中分离开来，分别处于两种不同的半导体中，可大大提高载流子的寿命。这些不同类型异质结的不同性质在半导体器件制造中都得到了应用。正是由于带阶在实际器件制造中的重要性，所以自从异质结问世以来，如何从理论上计算带阶就成为半导体界面研究工作中的一个重要内容。

1.3 影响异质结带阶的因素

1. 工艺过程

只有良好的工艺条件(例如采用分子束外延方法)才能保证异质结界面两边半导体的晶格结构是完好的。如果界面附近晶格结构不完整，由此引起的缺陷将导致界面态密度提高，使界面附近的能带弯曲，从而使带阶发生变化。

2. 异质结界面的晶向

- 族及 - 族半导体都是极性半导体，组成半导体的原子具有不同的电负性，即它们对电子束缚能力不同。例如半导体 $GaAs$ 中 Ga 和 As 对电子的束缚能力不相同，当组成晶体时，它们之间所形成的共价键常更多地偏向 As 原子一方，使 Ga 及 As 部分地带有正负离子的特性。这些半导体都具有闪锌矿结构，在界面是(100)和(111)的情况下，最外层的表面原子由一种原子组成，它们或是带正电的阳离子（如 Ga 原子），或

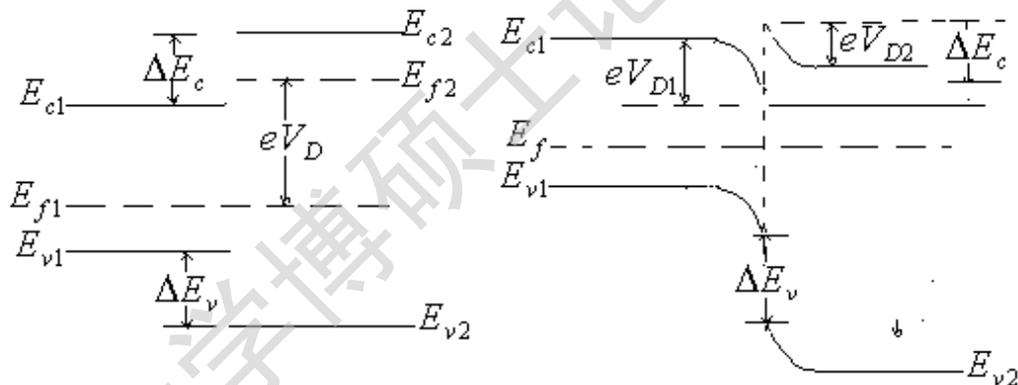
是带负电的阴原子（如 As 原子），所以这种表面都是极性表面。而界面是(110)面时，因为每个面都同时包含有两种不同原子，因此它是中性的，称为非极性表面。

当异质结表面为极性表面时，在界面处存在偶极矩，而偶极矩所产生的电势必然会改变带阶。所以，即使是由化学组分相同的两种半导体所组成的异质结，当异质结界面的晶向不同时，它们的带阶也有所不同。

3. 带阶与组成异质结的半导体特性有关

如果组成异质结的两种半导体材料分别是 III 族元素半导体及 V 族半导体或都是 III 族与 III 族半导体，那么在界面处常会发生原子的交换效应，这样在界面附近就会形成原子偶极矩，由此引起的电势也将改变带阶。

1.4 考虑电子交换后的异质结能带结构



图(1.3) 结面两边发生载流子相互交换以后的能带结构变化情况

当两块不同的半导体，特别是两块不同型号(N 型或 P 型)的半导体结合成异质结时，由于半导体的能带结构以及载流子浓度的不同，在不同半导体之间会发生载流子的相互交换，结果结面两边都形成空间电荷，建立结区的内建电场，使结区的能带结构发生弯曲。图 1.3 示出了一个宽禁带的 N 型半导体与窄禁带的 P 型半导体所组成的异质结在载流子发生相互交换后的能带结构变化情况。当达到热平衡时，结面两边的费米能级 E_{f1} 与 E_{f2} 必须相等。此时在结区形成势垒，势垒区电压降为 $eV_D = E_{f2} - E_{f1}$ ，分别降落

在异质结两边的半导体上： $eV_D = eV_{D1} + eV_{D2}$ 。因为存在电场，所以电子在空间电区中各点有附加电势能，使空间电荷区中的能带发生了弯曲。由图 1.3 可以看出，由于带阶 ΔE_c 及 ΔE_v 的存在，电子由 N 区导带进入 P 区导带所需越过的势垒变小：

$$eV_{D1} + eV_{D2} - \Delta E_c = eV_D - \Delta E_c < eV_D ;$$

而 P 区的空穴流向 N 区的价带所需越过的势垒变大：

$$eV_{D1} + eV_{D2} + \Delta E_v = eV_D + \Delta E_v > eV_D。$$

从图 1.3 看到，由两块半导体材料的交界面及其附近的能带可反映出两个特点：其一是能带发生了弯曲。N 型半导体的导带底和价带顶的弯曲量为 eV_{D2} ，而且导带底在交界面处形成一向上的“尖峰”。P 型半导体的导带底和价带顶的弯曲量为 eV_{D1} ，而且导带底在交界面处形成一向下的“凹口”。其二，能带在交界面处不连续，有一个突变。两种半导体的导带底在交界面处的突变 ΔE_c 为： $\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2$ 。

随着宽禁带半导体(常用 W 表示)及窄禁带半导体(常用 N 表示)导电类型的不同，异质结的能带图也常不相同。当两种禁带宽度不同的 N 型半导体形成异质结时，假定禁带宽度大的 N 型半导体的费米能级比禁带宽度小的高，那么电子将从前者向后者流动。结果在禁带宽度小的 N 型半导体一边形成了电子的积累层，而另一边形成了耗尽层。

1.5 异质结在半导体器件中的应用

异质结在半导体器件中具有广泛的应用，常见的有[9]：

一、提高少子的注射效率

由 N 型宽禁带半导体和 P 型窄禁带半导体所构成的异质结在正向偏压下，流过异质结的电流主要是注入 P 型窄禁带半导体中的电子电流，而反方向由 P 型窄禁带注入到 N

型宽禁带半导体的空穴电流可忽略。在半导体器件物理中常定义 $\gamma = \frac{j_n}{j} = \frac{j_n}{j_n + j_p}$ 为电

子的注射效率，它直接与 NPN 晶体管的电流放大倍数有关。因此若采用这样的异质结作为 NPN 晶体管的发射极与基极之间的 PN 结，就可以提高 NPN 晶体管的少子(电子)的注

射效率，从而提高 NPN 晶体管的电流放大倍数。同样，采用 P 型宽禁带与 N 型窄禁带半导体组成的异质结替代 PNP 晶体管的发射极与基极之间的 PN 结，可提高 PNP 晶体管的空穴注射效率，从而提高 PNP 晶体管的电流放大倍数。

二．调制掺杂技术提高载流子的迁移率

对于由 $GaAs$ 和 $Al_xGa_{1-x}As$ 构成的异质结，在宽禁带半导体 $Al_xGa_{1-x}As$ 中掺入施主杂质，使宽禁带半导体为 N 型材料。由于宽禁带半导体的导带比窄禁带的宽，因此宽禁带半导体中的电子都注入窄禁带半导体内，使导带电子与电离的施主杂质在空间位置上相互分离。电子在窄禁带半导体中运动，可以避免电离杂质的散射，可以使电子的迁移率大幅度提高。场效应管的频率特性主要决定于载流子的迁移率，载流子迁移率的提高可以使晶体管的频率特性得到很大的改善。

三．窗口效应

利用半导体的 PN 结可以制成光电池。当一光子能量 $\eta\nu$ 大于半导体禁带宽度 E_g 的光束射至 PN 结的势垒区时，电子由价带激发至导带，从而在势垒区中产生自由的电子和空穴。这些电子和空穴在 PN 结的内建电场作用下很快分离并产生光电动势。但对通常的同质 PN 结，入射光束在到达势垒区之前常被势垒区一侧半导体吸收而衰减，因而影响光电池的效率。如果入射光的光子能量 $\eta\nu$ 满足 $E_{g2} < \eta\nu < E_{g1}$ ，则入射光在宽禁带半导体中不会被吸收，因此通过宽禁带半导体这个“窗口”可以没有衰减地到达异质结的势垒区，从而提高光电池的工作效率。

四．异质结激光器[10,11,12]

要使半导体产生激光，首先必须使半导体满足“粒子数占据反转”的条件，就是使导带中存在大量电子，而价带中存在大量空穴。为此，通常采用电注入的方法，在正向偏压下，势垒区中心可达到“粒子数占据反转”条件。但在同质 PN 结情况下，这种能满足“粒子数占据反转”条件的区域非常小，因此效率比较低。若采用异质结(如窄禁带 $GaAs$ 与宽禁带 $Al_xGa_{1-x}As$)，由于它们之间存在较大的导带边失调值 ΔE_c ，因此在异质 PN 结的情况下，当施加正偏压时，在 P 型 $GaAs$ 层中都可以满足“粒子数占据反

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库