

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2017.03.022

电子在掺杂 GaAs/GaAlAs 斐波那契量子阱中波函数和能量性质

骆敏¹, 程子恒¹, 包建阳¹, 朱克杰²

(1. 南京林业大学理学院, 南京 210037; 2. 肥东圣泉中学, 肥东 231600)

摘要: 本文利用转移矩阵和边界条件精确计算一维定态薛定谔方程, 推导出一维斐波那契量子阱结构中电子波函数的计算条件. 考虑了在势阱中掺杂的情况, 并且认为势阱中掺杂仅仅只是改变势阱的宽度. 在半导体材料的参数范围内, 进一步研究了势阱宽度对一维掺杂斐波那契量子阱结构的电子能量本征值的影响.

关键词: 斐波那契量子阱结构; 本征波函数; 本征能量

中图分类号: O413.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2017)03-0557-04

The electronic energy properties of the doped GaAs/ GaAlAs Fibonacci quantum wells structure

LUO Min¹, CHENG Zi-Heng¹, BAO Jian-Yang¹, ZHU Ke-Jie²

(1. College of Science, Nanjing Forestry University, Nanjing 210037, China;

2. Feidong Shengquan Middle School, Feidong 231600, China)

Abstract: The eigen-wavefunction of the Fibonacci quantum well structure is presented based on an exact solution of the Schrödinger equation by using the transfer matrix approach and the boundary conditions. We think that in the case of one of the potential well containing impurities for the Fibonacci quantum wells structure, the impurities merely change the well width. For a selected range of parameters of semiconductor materials, the behavior of eigenenergy has been studied for the doped Fibonacci quantum well structure by changing the well width in the one of the potential well containing impurities.

Keywords: Fibonacci quantum wells structure; Eigen-wavefunction; Eigenenergy

1 引言

自从超晶格^[1]的概念被提出来, 超晶格被越来越多地研究^[2-14]. 超晶格是一种由两种材料交替生长而成具有周期性的半导体结构, 窄带隙的材料构成势阱, 宽带隙的材料构成势垒^[15]. 自从 R. Merlin^[16]研究了按斐波那契周期序列生长的超晶格结构的 X 射线和拉曼散射谱特性以来, 斐波那契量子阱结构就已经变成了标准模型. A-Li

Chen^[17]利用传输矩阵计算了两组分斐波那契光子晶体的能带结构. Yuping Zhang^[18]研究了斐波那契准周期石墨烯光子晶体的传输性质, 并计算了 TE (Transverse Electric) 和 TM (Transverse Magnetic) 波在不同入射角度和化学势情况下的能带带隙. Yamina Sefir^[19]计算了多势垒结构的透射系数, 并进一步分析了斐波那契超晶格结构参数对电子能量谱的影响. 上述理论研究了电子在结构中的传输性质、能带结构和透射系数, 但是没有分

收稿日期: 2015-11-03

基金项目: 南京林业大学 2015 年度大学生创新训练计划项目(2015sjcx152)

作者简介: 骆敏(1984-), 男, 安徽宿州人, 实验师, 研究方向为量子阱和低维量子系统. E-mail: luominnj@126.com

析电子在结构中的本征波函数的变化规律及在掺杂情况下的能级图谱. 本文采用边界条件和传输矩阵方法推导出计算电子波函数的矩阵公式, 分析其变化规律及势阱中掺杂对能级图谱的影响.

2 模型和理论

本文采用的量子阱结构如图 1 所示, 其中, N 为势垒的个数, v_0 为势垒高度, 势垒和势阱中电子的有效质量分别为 m_b^* 和 m_w^* , 势垒和势阱宽度分别为 b_1, b_2, a . 斐波那契量子阱结构沿着 x 方向生长, 其迭代生成法则为 $B \rightarrow A, A \rightarrow AB$, 假定初始值(定义为第 0 代) $F_0 = A$, 则 $F_1 = AB, F_2 = ABA, F_3 = ABAAB, \dots, F_n = F_{n-1} * F_{n-2}$.

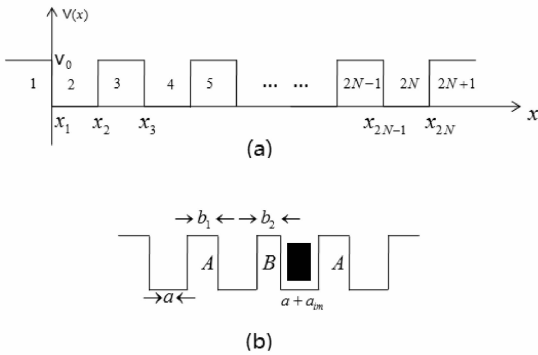


图 1 (a)一维矩形量子阱结构; (b)第二代掺杂斐波那契矩形量子阱结构.

Fig. 1 (a) One dimensional rectangular quantum wells structure; (b) the square potential of the second doped Fibonacci quantum well structure.

现考虑将 GaAs/GaAlAs 导带简化成多势垒结构, GaAs 形成势阱, GaAlAs 形成势垒, 如图 1 (a)所示, 电子从左向右入射. N 层矩形量子阱结构形成了 $2N+1$ 个区域, 每个区域的势能为:

$$V(x) = \begin{cases} V_n = 0 & n = 2, 4, 6, \dots, 2N \\ V_n = v_0 & n = 1, 3, 5, \dots, 2N + 1 \end{cases}$$

在每个区域利用薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} \psi(x) \right) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

在每个势阱和势垒的边界波函数和波函数一阶导数连续 ($x_1, x_2, x_3, x_4, \dots, x_{2N-1}, x_{2N}, \psi_j = \psi_{j+1}, \frac{1}{m_j} \psi'_j = \frac{1}{m_{j+1}} \psi'_{j+1}$ [20]), 从而我们可得到:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = M_{jj} \times M_{j+1j} \times \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} \quad j=1, 2, \dots, 2N \quad (2)$$

现在我们假定具有一定能量的粒子由斐波那契量子阱结构的最左边向右方入射. 在区域 1 和区域 $2N+1$ 的波函数分别为:

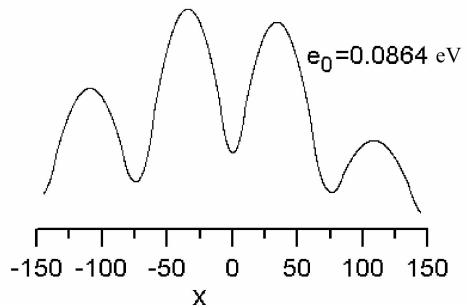
$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 \cosh(k_1 x) + B_1 \sinh(k_1 x) = \\ &= \frac{1}{2} (A_1 + B_1) e^{k_1 x} + \frac{1}{2} (A_1 - B_1) e^{-k_1 x} \\ x \rightarrow -\infty, \psi_1 &\rightarrow 0 \Rightarrow A_1 = B_1. \\ \psi_{2N+1} &= A_{2N+1} \cos(k_{2N+1} x) + \\ &= B_{2N+1} \sin(k_{2N+1} x) = \frac{1}{2} (A_{2N+1} + B_{2N+1}) e^{k_{2N+1} x} + \\ &= \frac{1}{2} (A_{2N+1} - B_{2N+1}) e^{-k_{2N+1} x} \rightarrow +\infty, \\ \psi_{2N+1} &\rightarrow 0 \Rightarrow A_{2N+1} = -B_{2N+1}. \end{aligned}$$

我们选择 $A_1 = B_1$ 或 $A_{2N+1} = -B_{2N+1}$ 并另其等于常数 ($A_1 = B_1 = \pm 1, \pm 2, \dots; A_{2N+1} = B_{2N+1} = \pm 1, \pm 2, \dots$). 其它的振幅 (A_j, B_j) 可通过方程(2)式计算得到.

3 计算结果和分析

3.1 本征波函数

通过对图 2 的观察可以得到: (1)本征波函数的节点(灰色图点标记)随着能量本征值相应的增加, 基态 (E_0) 有 0 个节点, 第七激发态具有 7 个节点. (2)所有能量本征波函数交替具有近似奇偶对称性 ($\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(+x)$), $\psi_n(x)$ 具有 n 个节点 ($n = 0, 1, 2, \dots$), E_0, E_2, E_4, E_6 对应的本征波函数具有近似偶对称; E_1, E_3, E_5, E_7 对应的本征波函数具有近似奇对称. 这是因为坐标原点取在势阱结构的中心, 势能具有近似的镜像对称 ($V(-x) = V(+x)$). 在一维势阱结构中, 可以通过本征波函数的节点数来判断能级, 即有 n 个节点对应 E_n .



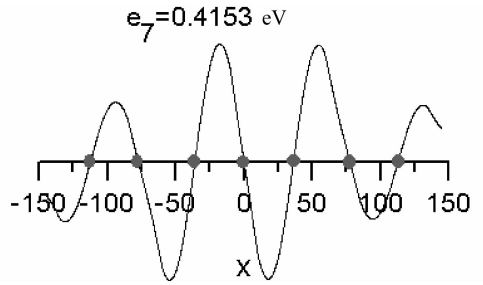
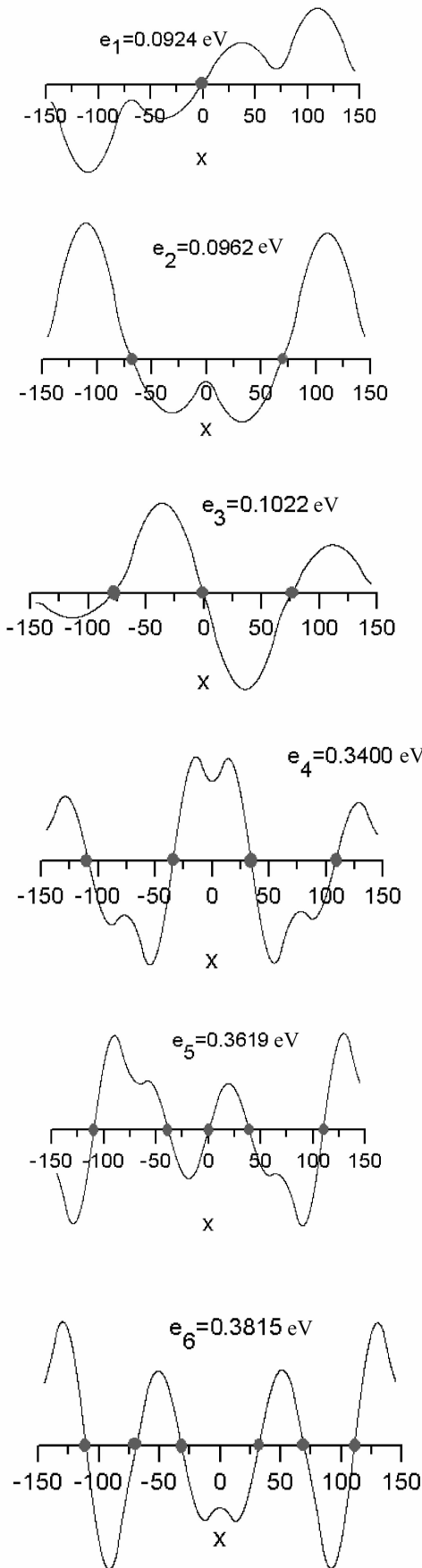


图 2 第二代斐波那契量子阱结构的本征波函数. 有效质量分别为 $m_w^* = 0.067m_0, m_b^* = 0.1085m_0$, 势垒宽度为 $b_1 = 2.5 \text{ nm}, b_2 = 2.0 \text{ nm}$, 势阱宽度为 $a = 5.0 \text{ nm}$, 势垒高度为 $v_0 = 0.5 \text{ eV}$.

Fig. 2 The eigen-wavefunction of the second Fibonacci quantum well structure. The effective mass $m_w^* = 0.067m_0, m_b^* = 0.1085m_0$, the barrier width $b_1 = 2.5 \text{ nm}, b_2 = 2.0 \text{ nm}$, the well width $a = 5.0 \text{ nm}$, the barrier height $v_0 = 0.5 \text{ eV}$.

3.2 本征能量谱

3.2.1 杂质改变的势阱宽度 a_{im} 对能量谱的影响

通过对图 3 的观察可以得到: (1) 形成两个微带, 两微带之间的区域为微带隙, 电子能级在每个微带中周期性出现, 微带的形成是由于相邻势阱间的耦合相互作用. (2) 掺杂引起的势阱宽度的变化 a_{im} 对能量谱具有显著的影响. 随着 a_{im} 增大, 高微带的最低能级通过微带隙有逐渐下降到低微带的顶部能级的趋势. 低微带的顶部能级可近似看作是高微带的最低能级通过微带隙的延伸. (3) 随着 a_{im} 增大, 电子能级的数目也在增加.

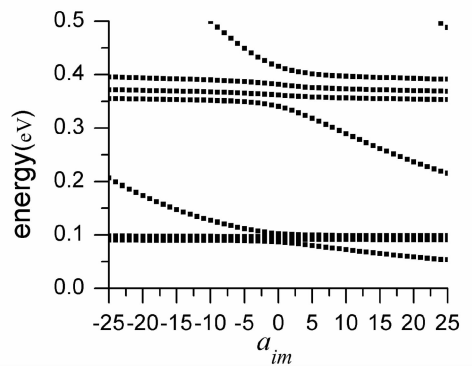


图 3 第二代掺杂斐波那契量子阱结构能量本征值和 a_{im} 之间的关系. 有效质量分别为 $m_w^* = 0.067m_0, m_b^* = 0.1085m_0$, 势垒宽度为 $b_1 = 2.5 \text{ nm}, b_2 = 2.0 \text{ nm}$, 势阱宽度为 $a = 5.0 \text{ nm}$, 势垒高度为 $v_0 = 0.5 \text{ eV}$.

Fig. 3 The energy levels of the F_2 (three wells) Fibonacci quantum well as a function of the well width. The effective mass $m_w^* = 0.067m_0, m_b^* = 0.1085m_0$, the barrier width $b_1 = 2.5 \text{ nm}, b_2 = 2.0 \text{ nm}$, the well width $a = 5.0 \text{ nm}$, the barrier height $v_0 = 0.5 \text{ eV}$.

4 结 论

本文运用转移矩阵方法和边界条件研究了 GaAs/GaAlAs 斐波那契量子阱的电子性质, 分析和研究了第二代斐波那契量子阱结构的波函数的变化情况和规律以及在其中一个势阱掺杂条件下分析了电子能量谱的变化规律. 通过计算我们可以得出以下结论: (1) 能量本征波函数交替具有近似奇偶对称性, 在一维势阱结构中, 可以通过本征波函数的节点数来判断能级, 即有 n 个节点对应 E_n . (2) 掺杂引起的势阱宽度的变化 a_{im} 对能量谱具有显著的影响. 高微带的最低能级通过微带隙有进入低微带带沿的趋势. 低微带的顶部能级可近似看作是高微带的最低能级通过微带隙的延伸.

综上所述, 我们可以通过掺杂来改变能带结构, 来实现人工对能带结构的重新剪裁, 以获得所希望的能带结构, 从而可以制造出一些人工晶体材料和新型量子器件. 一些在体材料中不能观察到的奇异的物理现象可能在这些结构中观察到. 另外可以通过外加电场和磁场来进一步研究电子在斐波那契量子阱结构中的电学和光学性质. 同时对实验和器件研究也具有一定的参考和指导作用.

参考文献:

- [1] Esaki L, Tsu R. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors [J]. IBM J Res Dev, 1970, 14(1): 61.
- [2] Palomino-Ovando M, Cocolletti G H. Transport properties of Fibonacci heterostructures; a nonparabolic approach [J]. Superlattice Microst, 1998, 24(1): 7.
- [3] Aynaou H, Nougouai A, Boudouti E H El, *et al.* Comparative study of the sagittal elastic waves in metallic and semiconductor multilayer systems between periodic and Fibonacci superlattices [J]. Surf Sci, 2005, 584: 199.
- [4] Velasco V R. Electronic spectra of quasi-regular Fibonacci systems: Analysis of simple 1D models [J]. Microelectron J, 2005, 36: 882.
- [5] de Medeiros F F, Albuquerque E L, Vasconcelos M S, *et al.* Exciton-polariton confinement in Fibonacci quasiperiodic superlattice [J]. Surf Sci, 2006, 600: 4337.
- [6] Montalbán A, Velasco V R, Tutor J, *et al.* Phonons in hybrid Fibonacci/periodic multilayers [J]. Surf Sci, 2009, 603: 938.
- [7] Aziz Z, Bentata S, Djelti R, *et al.* Suppression of the singularly localized states in dimer quasiperiodic Fibonacci superlattices [J]. Solid State Commun, 2010, 150: 865.
- [8] Djelti R, Aziz Z, Bentata S, *et al.* Resonant tunneling in GaAs/AlGa1As superlattices with aperiodic potential profiles [J]. Superlattice Microst, 2011, 50: 659.
- [9] Martínez-Gutiérrez D, Velasco V R. Transverse acoustic waves in piezoelectric ZnO/MgO and GaN/AlN Fibonacci-periodic superlattices [J]. Surf Sci, 2014, 624: 58.
- [10] 骆敏, 杨双波. 外场中多势垒结构的共振传输 [J]. 南京师范大学学报: 自然科学版, 2012, 35(4): 34.
- [11] Meghouel F Z, Bentata S, Terkhi S, *et al.* Electronic transmission in non-linear potential profile of GaAs/AlGaAs biased quantum well structure [J]. Superlattice Microst, 2013, 57: 115.
- [12] Emine Ozturk, Yasin Ozdemir. Linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficient and refractive index change in n-type δ -doped GaAs structure [J]. Opt Commun, 2013, 294: 361.
- [13] Nguyen Q B, Nguyen V H. The quantum acoustoelectric current in a doped superlattice GaAs: Si/GaAs: Be [J]. Superlattice Microst, 2013, 63: 121.
- [14] Sattari F, Faizabadi E. Spin transport and wavevector-dependent spin filtering through magnetic graphene superlattice [J]. Solid State Commun, 2014, 179: 48.
- [15] 夏建白, 朱邦芬. 半导体超晶格物理 [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1995.
- [16] Merlin R, Bajema K, Clarke R, *et al.* Quasiperiodic GaAs-AlAs Heterostructures [J]. Phys Rev Lett, 1985, 55(17): 1768.
- [17] Chen A L, Wang Y S, Guo Y F, *et al.* Band structures of Fibonacci phononic quasicrystals [J]. Solid State Commun, 2008, 145: 103.
- [18] Zhang Y, Wu Z, Cao Y, *et al.* Optical properties of one-dimensional Fibonacci quasi-periodic graphene photonic crystal [J]. Opt Commun, 2015, 338: 168.
- [19] Yamina S, Zoubir A, Redouan D, *et al.* Achievement of tailored laser frequencies by fine-tuning the structural parameters of Fibonacci's in AlGa1As/GaAs superlattices [J]. Superlattice Microst, 2013, 62: 233.
- [20] Bastard G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation [J]. Phys Rev B, 1981, 24(10): 5693.