

非对称双势垒结构中电子态的特异性*

宋爱民 郑厚植

(半导体超晶格国家重点实验室 中国科学院半导体研究所 北京 100083)

摘要 在包络波函数近似下自洽计算了非对称双势垒结构(DBS)中的电子态,并正确得到了积累区和中央势阱中准束缚能级 E_{ac} 、 E_{wc} 随偏压变化的反交叉过程. 结果首次揭示了如果适当选取 DBS 的入射垒厚度,随着外加电场不断增加,在过共振区积累层势阱和中央势阱会统一成一个大三角势阱的基态能级 E_{com} , E_{com} 具有很好的二维性,这表明在过共振区 DBS 在入射端积累区中只存在二维电子.

PACC: 7150, 7360F, 7340G

1 引言

自从 1974 年张立纲等在实验上成功地实现了双势垒共振隧穿^[1]以后,由于双势垒结构(DBS)是最简单的半导体低维结构之一,同时又涉及许多基本的物理问题,一直是人们十分关注的研究热点. 负微分电导、电荷存贮、电双稳态^[2,3]、共振及非共振隧穿^[4,5]、三维至二维隧穿(3D—2D)及二维至二维隧穿(2D—2D)^[6,7]等一系列新的物理现象相继被发现. 当然,尽管已有大量深入的理论和实验工作^[8,9],一些双势垒结构的基本物理机制尚需进一步的研究^[9]. 本文采用有效质量近似下的自洽计算,给出了非对称双势垒结构工作在不同偏置条件下及不同器件结构时的电子态. 计算发现在过共振区我们所采用的 DBS 入射端积累层势阱和 DBS 中央势阱中的电子态不再相互独立,而是演变成统一的大三角势阱中的二维电子态,由此从理论上进一步验证我们以前利用 DBS 测量二维电子朗道态密度实验^[10]的原理的正确性.

2 计算模型

计算采用的 DBS 的两个 AlAs 垒的厚度分别为 12 Å 和 25 Å,中间 GaAs 势阱宽 75 Å. 与两垒紧邻的 GaAs 隔离层(spacer)各为 200 Å,隔离层外是 1500 Å 的 $2 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 至 $2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 的渐变掺杂层,电极区采用 $2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 的重掺杂. 根据积累层势阱中和中央阱中的准束缚能级 E_{ac} 、 E_{wc} 的高度($\sim 0.1 \text{eV}$)和单势垒透射系数公式不难估计出入射垒和出射垒的透射系数 T_e 、 T_c ,并得到 $T_e \gg T_c$. 因此^[11],我们假定共振时中央阱中存储的电子总能与

* 国家攀登计划重大项目

宋爱民 男,1967年生,博士,现从事低维半导体输运研究

郑厚植 男,1942年生,研究员,博士生导师,现从事低维半导体物理研究

1994年12月15日收到初稿,1995年2月8日收到修改稿

入射端电子共有一个统一的费密能级 E_F . 因为隔离层两侧的渐变掺杂层的厚度和掺杂浓度都较大, 足以屏蔽 DBS 势垒区的电场, 处在它外侧的重掺杂区内的导带边应是平的. 我们取这里的导带底为能量的零点.

考虑到电子由出射垒出射后会很快地被声子散射弛豫到导带底, 电子完全丧失相位记忆, 我们在计算波函数时, 以出射垒为界把 DBS 分成左右两部分分别求解. 同时, 利用出射垒较厚、较高的特点, 认为左右两边的纵向波函数 ($\Phi_l(z)$ 和 $\Phi_r(z)$) 都在出射垒内衰减至零. 计算时, 给定出射垒上的电场 F , 分别求解波函数 $\Phi_l(z)$ 和 $\Phi_r(z)$.

我们在包络波函数近似下联立自洽求解 Schrödinger 方程和 Poisson 方程. 由于采用 $T=0K$ 近似, 只有 E_F 以下的电子态对隧穿有贡献. 我们把能量区间 $0-E_F$ 均分成 N 个小区间, 分别计算对应于 $E_{xi}=i * E_F/N$ 和 z 方向波函数 $\Phi_i(z)$. Poisson 方程中的电荷密度 $\rho(z)$ 应包含两项, 即电离施主的贡献 $eN_d(z)$ 和电子的贡献 $-\rho_{3D}(z)$. 由于 n^+ 重掺杂层远离双势垒区, 我们有理由认为那里的三维电子在相空间以费密球分布, 而在其它各层, 如积累层势阱或中央阱内, 由于量子限制用电子在相空间会严重偏离费密球分布. 对 n^+ 重掺杂层, 能量区间 ΔE_{xi} 内的三维电子浓度 ΔN_{3Di} 为

$$\Delta N_{3Di} = 2 \times 2 \times \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3 \times \int_{k_{xi}}^{k_{xi+1}} \pi(k_F^2 - k_z^2) dk_z \quad (1)$$

上式右边两个倍乘因子 2 分别代表自旋简并和正负 k_z 的贡献, $k_{xi} = \sqrt{2m^* E_{xi}}/\hbar$. 积分(1)式得

$$\begin{aligned} \Delta N_{3Di} &= \frac{1}{2\pi^2} \left[k_F^2 (k_{xi+1} - k_{xi}) - \frac{k_{xi+1}^3 - k_{xi}^3}{3} \right] \\ &= \frac{m^* \sqrt{2m^*}}{\pi^2 \hbar^3} \left[E_F (E_{xi+1}^{1/2} - E_{xi}^{1/2}) - \frac{E_{xi+1}^{3/2} - E_{xi}^{3/2}}{3} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

因此

$$\rho_{3D}(z) = \sum_{i=1}^N \Delta \rho_{3Di}(z) = e \sum_{i=1}^N \Delta N_{3Di} |A_i \Phi_i(z)|^2 \quad (3)$$

式中 A_i 是 $\Phi_i(z)$ 的归一化因子. 显然 A_i 选取时应使得 $\Delta \rho_i(z)$ 在重掺杂区内的平均值等于 $e\Delta N_{3Di}$.

3 不同偏压下 DBS 中的电子态

出射垒右侧的情况较简单, 只需在不同的出射垒电场 F 下计算其导带边和电压降. 因此计算的重点在出射垒左侧的入射端. 我们由 0 到 E_F 扫描入射电子能量 E 求电子在积累层势阱、中央势阱中的相对几率 $\int_{ac} |\Phi(z)|^2 dz / \int_{all} |\Phi(z)|^2 dz$ 和 $\int_{we} |\Phi(z)|^2 dz / \int_{all} |\Phi(z)|^2 dz$, 得到积累层势阱和中央势阱中的准束缚能级 E_{ac} 、 E_{we} . 图 1(a) 给出了典型的计算结果, 图中虚线和实线分别代表中央阱中和积累层中的准束缚能级能谱 (已根据各自的峰值归一化). 为方便起见, 这里及下文中 F 的单位取为 $(e \times 10^{11} \text{cm}^{-2})/\epsilon$, 即 $F=1$ 对应于浓度 N_{2D} 为 $1 \times 10^{11}/\text{cm}^2$ 的二维电子在 GaAs 中产生的电场. 图 1(a) 中虚线只有一个峰, 说明中央阱中只有一个准束缚能级 E_{we} 和 $E_{we}=94\%$ 表示 E_{we} 的 94% 处在 E_F 的 94% 处). 实线却有两个峰, 其中较高的峰与 E_{we} 的能谱重合. 为弄清哪一个峰对应于积累层势阱中的准束缚能级 E_{ac} , 我们有意把入射垒的厚度加大到 25 Å, 结构的其他参数不变, 结果见图 1(b). 容易看出, 与 E_{we}

能谱重合的谱峰其实是由于在 $E_z = E_{we}$ 时, 幅度很大的中央阱中波函数向积累层势阱中的渗透所致. 当入射垒的厚度增至 $25 \text{ \AA}$ 时, 这种渗透效应减弱, 相应的“虚假峰”高度明显降低. 至此可以肯定, 左边的实线峰才对应积累层中的准束缚能级 E_{ac} .

由图 1 可见, 通过计算准束缚能级的能量谱可比以往对 DBS 的计算更清楚、直观地给出 DBS 中准束缚能级位置、能级展宽等电子态信息, 而更利于认识 DBS 中的电子结构.

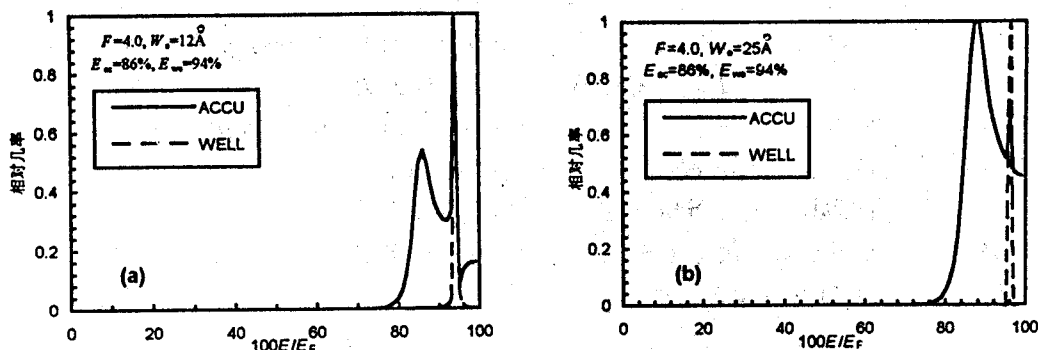


图 1 中央阱和积累层中准束缚能级能谱的典型结果
入射垒厚分别为(a)12 Å、(b)25 Å

以下我们分别给出不同偏压下 DBS 中准束缚能级的能谱结果. 当偏压较小、DBS 尚未进入共振, 由于电场作用 E_{we} 和 E_{ac} 都随偏压增大逐渐下降并相互靠近. 图 2(a)、(b) 给出了外加偏压 V 或出射垒右端电场 F 逐渐增大时的准束缚能级能谱. 这里, 由于 V 较小时 E_{we} 和 E_{ac} 能级位置都较高, 为清楚起见我们在 $0-1.5E_F$ 的范围内扫描能量 E .

继续增加偏压使 DBS 进入到共振区域, 计算结果发现 E_{we} 、 E_{ac} 及其间距不随偏压改变, 只是其相对强度随偏压增加有所转换 (见图 2(c)、(d)). 这说明两个准束缚能级已经耦合在一起、DBS 处在共振状态. 我们还计算了 DBS 共振状态下 $E_z = E_{ac}$ 、 E_{we} 时的波函数, 发现它们分别呈现类似对称与反对称的特点. 这里“类似”是指因为势阱形状本身并不具有对称性, 因而波函数也不会有严格的对称性, 但是在中央势阱和积累层势阱的范围内, $E_z = E_{ac}$ 的波函数与零线没有交点, 呈现出类似对称的特点; 而 $E_z = E_{we}$ 的波函数与零线有一个交点, 呈现出类似反对称的特点. 这也从另外一个角度说明两个准束缚能级已经耦合在一起、DBS 处在共振状态.

随着偏压继续增加, DBS 进入到过共振区, 结果发现 E_{we} 、 E_{ac} 重合在一起成为共有能级 E_{com} (图 2(e)、(f)). 这说明随着偏压的进一步增加, 入射垒的隔离作用下降, 已不足以使其左右势阱各自维持较独立的准束缚能级, 于是可以看做是一个大三角阱. 这一结果与通常文献中的过共振时 E_{we} 、 E_{ac} 相互错开并逐渐远离的物理图象不同. 由图 2(e) 和 (f) 还可以看到, 随着偏压或电场 F 的增加, E_{com} 逐渐下移. 这是因为电场 F 越大, “大三角阱”越深, 阱中能级也随之降低. 另外, 不难发现 E_{com} 具有很好二维性, 由此证明了我们以前利用 DBS 测量二维电子朗道态密度实验^[10]原理的正确性 (即在过共振区入射端积累层势阱中只存在二维电子气). 还容易看到, F 的增加使得“大三角势阱”中准束缚能级的二维性越来越好, 在 $F=9.0$

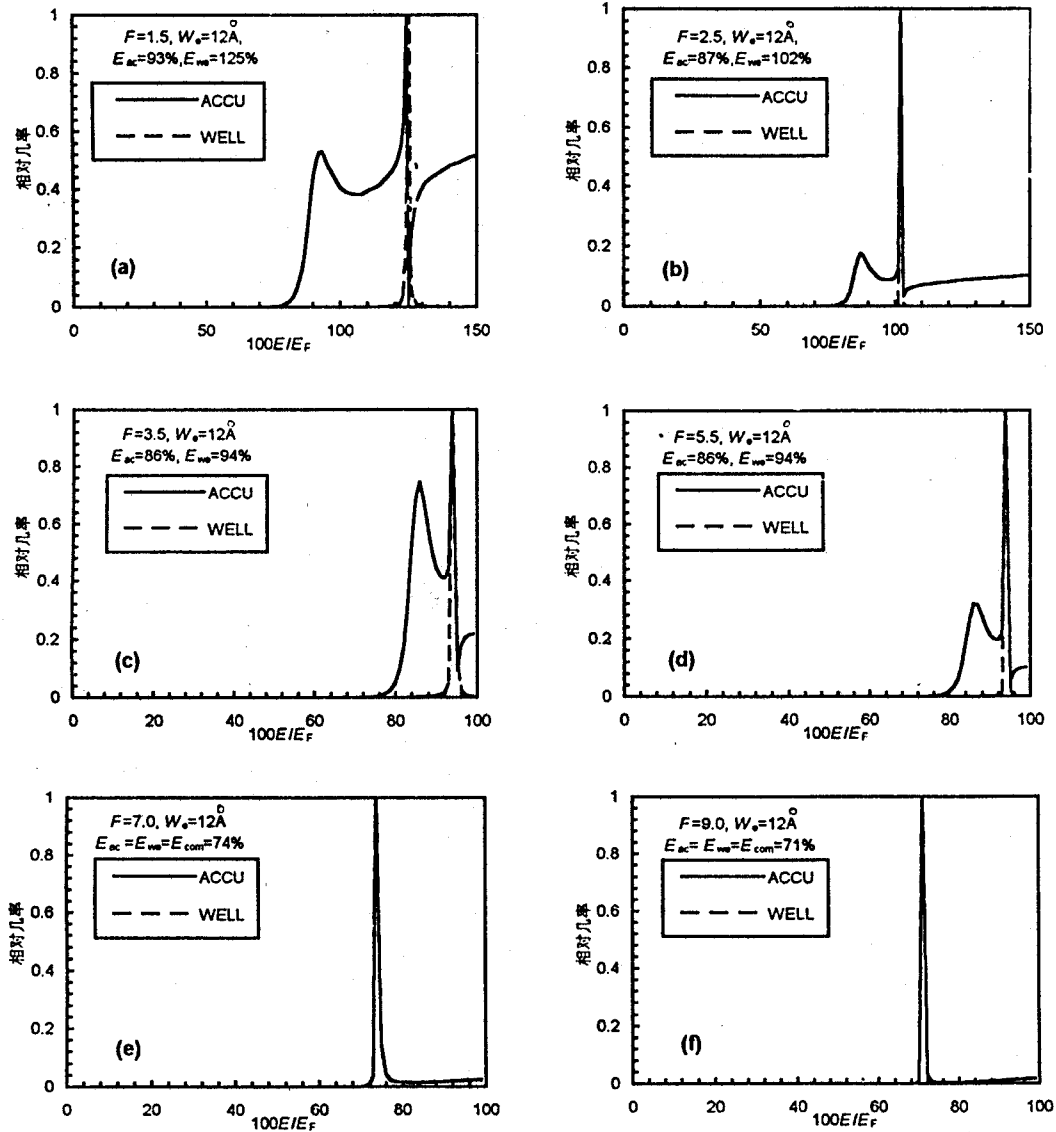


图2 共振前(a,b)、共振中(c,d)和过共振(e,f)情况下
中央阱中和积累层中的准束缚能级能谱

时其半高宽已小于 E_F 的 1% 或 0.8 meV. 由过共振时“大三角阱”中准束缚能级高度可以定出阱中二维电子浓度约为 $7 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, 并且 N_{2D} 随偏压增高而变大, 这与由磁电容振荡得到的实际结果相符^[10].

4 总结

在一个较简单的模型下我们的计算较为清晰地给出了 DBS 积累层势阱和中央阱中的二维子能级的反交叉过程和状态耦合的物理图象. 由计算获得的几个主要结论如下: 随着偏压的增长, 在共振前, 入射端积累层中和中央势阱中的准束缚能级 E_{ac} 、 E_{we} 下降并相互靠近; 在共振区, E_{we} 、 E_{ac} 位置及其间距不变, 反映了它们之间的共振耦合. 我们的计算首次表明, 如果适当选取 DBS 的入射垒厚度, 在过共振区随着外电场的增加, 薄势垒的隔离作用越来越弱, 积累层势阱和中央阱会等效成一个统一的大三角阱, 准束缚能级 E_{ac} 、 E_{we} 不再是相互错开而是会统一在一起成为“大三角阱”的基态能级 E_{com} . 并且 E_{com} 具有很好的二维性, 因此可以说在过共振区入射端积累层势阱中只存在二维电子气. 另外, 由过共振时“大三角势阱”中准束缚能级的高度定出的阱中二维电子浓度 N_{2D} 也与实验结果相符.

参 考 文 献

- [1] L. L. Chang, L. Esaki and R. Tsu, Appl. Phys. Lett., 1974, **24**:593.
- [2] M. L. Leadbeater, E. S. Alves, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, F. W. Sheard and G. A. Toombs, Semicond. Sci. Technol., 1988, **3**:1060.
- [3] F. W. Sheard and G. A. Toombs, Semicond. Sci. Technol., 1992, **7**:B460.
- [4] J. Goldman, D. C. Tsui and J. E. Cunningham, Phys. Rev., 1987, **B36**:7635.
- [5] Hou-zhi Zheng, Fuhua Yang and Zonggui Chen, Phys. Rev., 1990, **B42**:5270.
- [6] M. L. Leadbeater, E. S. Alves, F. W. Sheard, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes and G. A. Toombs, J. Phys., Condens. Matter., 1989, **1**:190.
- [7] 郑厚植, 物理学进展, 1993, **13**:190.
- [8] N. C. Kluksdahi, A. M. Krivan, D. K. Ferry and C. Ringhofer, Phys. Rev., 1989, **B39**:7720.
- [9] Yuming Hu and Shawn P. Stapleton, IEEE J. Quantum Electron., 1993, **29**:2.
- [10] Hou-zhi Zheng, Aimin Song, Fu-hua Yang and Yue-xia Li, Phys. Rev., 1994, **B49**:1802.
- [11] F. W. Sheard and G. A. Toombs, Appl. Phys. Lett., 1988, **52**:1228.

Extraordinary Properties of Electronic States in An Asymmetric Double Barrier Structure

Song Aimin and Zheng Houzhi

(National Laboratory for Superlattices and Microstructures

Institute of Semiconductors, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)

Received 15 December 1994, revised manuscript received 8 February 1995

Abstract A self-consistent calculation based on effective mass theory is presented to evaluate the electronic states in an asymmetric double barrier structure (DBS). The results correctly show an anticrossing between the quasibound level in the accumulation layer, E_{ac} , and that in the central well, E_{we} , as the applied bias is swept from pre-resonant to off-resonant regions. Our calculation verifies, for the first time, that if a suitable thickness of the emitter barrier is adopted and the DBS is biased beyond resonance, the accumulation layer and the central well may combine into one large triangle-like potential well because the isolation effect of the emitter barrier is substantially reduced by increasing electric field. As a result, E_{ac} and E_{we} no longer separate from each other but combine, into one united level E_{com} , i. e., the ground level in the large united well. Since E_{com} is almost of pure two dimensionality, our calculation verifies that there exist only two dimensional electrons in the accumulation layer of the DBS as biased beyond resonance.

PACC: 7150, 7360F, 7340G