

陈亚孚 万春明 卢俊 著

超晶格量子阱物理



兵器工业出版社

超晶格量子阱物理

陈亚孚 万春明 卢俊 著

兵器工业出版社

内 容 简 介

本书共 6 章，第一、二、三章论述了量子论、固体物理和半导体物理的基本概念及主要理论方法，强化了相关物理概念，精炼了相关物理理论结构，为非物理专业人员研究和掌握超晶格量子阱物理提供了方便；第四、五、六章讲述了超晶格二维平面运动、垂直界面运动和光学应用及低维超晶格，阐述了超晶格量子阱物理的基本问题和主要应用。

本书可供物理专业和光电子专业的工程技术人员参考，也可供本科、硕士和博士研究生及教师参考。

图书在版编目(CIP)数据

超晶格量子阱物理 / 陈亚孚，万春明，卢俊著. —北京：兵器工业出版社，2002.9

ISBN 7-80172-085-7

I. 超… II. ①陈… ②万… ③卢… III. 量子论
—研究 IV. 0413

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 070085 号

出版发行：兵器工业出版社

封面设计：底晓娟

责任编辑：郭 佳

责任校对：王 绰 全 静

责任技编：魏丽华

责任印制：王京华

社 址：100089 北京市海淀区车道沟 10 号

开 本：787×1092 1/16

印 刷：兵器工业出版社印刷厂

印 张：16.125

版 次：2002 年 9 月第 1 版 2002 年 10 月第 2 次印刷

字 数：390 千字

印 数：551—1350

定 价：28.00 元

(版权所有 翻印必究 印装有误 负责调换)

序

超晶格量子阱概念的提出，已经 30 多年了，目前已经发展为一门应用物理学科和高新技术领域。我国学者和工程技术人员对此领域的研究和应用已经有 20 多年。尤其是近十年来随着政府财政支持的力度不断加强，研究和应用开发的成果已经受到国内外人士的广泛重视，研究队伍正在迅速壮大，形成了一支可观的研究队伍，有越来越多的青年科技工作者、大学生和研究生关心超晶格量子阱的发展，并准备投身在这个领域中工作，这是十分可喜的事情。

使我们感到不足的是系统介绍超晶格量子阱的书太少，虽然国内外杂志上的论文很多，但都是专题性和专门技术方面的内容，且有相当多的实验报导，这对培养超晶格量子阱方面的研究人才是很不利的。出版本书可以弥补这个不足，相信会对现在和未来的科技工作者有所帮助。

超晶格量子阱是在异质结半导体物理的研究中提出来的，但从 30 年来的发展中可以看到，它已经是凝聚态物理的前沿学科，它的技术开发已经是光电信息产业的支柱技术。它的出现对凝聚态物理和材料学的发展具有重要的意义，它所揭示的大尺寸量子效应、人工制造周期性晶体材料、微带和子能带效应、负阻效应、激子效应和量子霍尔效应等都是量子物理、固体物理和半导体物理的突破性发展，也都渗透着超晶格量子阱创始人和发现者们对这三门基础物理学科的深透理解和应用，因而掌握和接受超晶格量子阱的物理思想和概念也必须具备这三门学科的物理基础。人们都知道，这三门物理学是物理学理论中难度比较大的学科，这也正是许多青年学者对超晶格量子阱望而生畏的原因。本书针对这个难点，对量子论、固体物理和半导体物理的基本结构、重要概念和基本理论方法进行了简洁的论述，扫除了基础物理概念的障碍，非常适合初学者尽快学习和掌握超晶格量子阱物理的内容。

本书按照物理学的理论结构，从基本物理理论概念出发，把超晶格量子阱的内容组织为一门应用物理的学科体系。具有条理清楚、物理概念准确、简明适用的特点。对于开始涉足超晶格量子阱研究的学者、大学生和研究生是一本比较好的参考书。

刘元伟

2001 年 10 月 25 日

前 言

本书是作者在近年来为物理电子学、凝聚态物理、微电子学和光学工程专业研究生开设的“超晶格量子阱”课程的讲稿基础上整理而成。

70 年代提出的超晶格量子阱引起了光电子技术的一次革命，如今理论研究和应用研究仍然处在高潮中，感兴趣的人越来越多，许多光电子类的硕士和博士研究生课程都把超晶格量子阱设为学位课，事实上已经形成了一门应用物理学科和技术领域，在这个学科中工作和学习的大学生、研究生和科技工程人员迫切需要有一本能从基础物理概念方面系统阐述超晶格量子阱物理的书，并且这个学科所涉及到的量子物理、固体物理和半导体物理的概念、原理和方法难度比较大，为此出版这本《超晶格量子阱物理》，把散见在文献和其它专业书籍中的内容组织为学科体系，并强化了量子物理、固体物理和半导体物理的基本概念基础和内容，可能对这些读者有所帮助。

本书定名为《超晶格量子阱物理》，理由有两个：第一是超晶格量子阱虽然是在异质结半导体物理中产生的，但它是 20 世纪末凝聚态物理的前沿学科，其物理思想和概念方法是量子物理、固体物理和半导体物理的自然发展，对这三门物理学科没有透彻的理解，是无法接受超晶格量子阱的物理思想的，更不用说开展技术应用；第二是超晶格量子阱的研究对象和一系列大尺寸量子效应，以及它所提出的新概念、新规律，对凝聚态物理和材料科学的发展具有重要的指导和启发性的意义，有些是带有方向性的问题，是当今凝聚态物理发展的一面旗帜！

本书对非物理专业的读者也非常适用，因为前三章对相关的物理概念和理论方法进行了简洁的论述。

刘式墉教授、任大翠教授对本书的初稿进行了详细的审阅，并提出许多有益的修改意见。张靓、倪牟翠、王蓟三位研究生对本书的文字和图表做了大量的工作，在此一并表示感谢。

由于编写时间紧迫，水平有限，本书中难免会有错误，望读者批评指正，谢谢。

作者

2001 年 5 月 20 日

目 录

| | |
|-------------------------------|----|
| 绪 论..... | 1 |
| 1. 超晶格量子阱的物理背景..... | 1 |
| 2. 超晶格量子阱的实验发现..... | 3 |
| 3. 超晶格量子阱的能带结构原理与分类..... | 5 |
| 4. 超晶格量子阱物理的研究内容..... | 8 |
| 5. 超晶格量子阱的发展和应用前景..... | 9 |
| 第一章 量子论基础..... | 11 |
| 1.1 量子论的基本概念和基本原理评述..... | 11 |
| 1.1.1 一个观点..... | 12 |
| 1.1.2 两条规律..... | 12 |
| 1.1.3 五条基本原理..... | 14 |
| 1.2 一维单势阱的量子现象..... | 16 |
| 1.2.1 一维无限深方势阱..... | 16 |
| 1.2.2 有限深方势阱..... | 17 |
| 1.2.3 一维线性谐振子..... | 18 |
| 1.2.4 H 原子中电子运动的球势阱..... | 20 |
| 1.3 一维势垒与势阱的量子透射 | 24 |
| 1.3.1 一维势垒的量子透射 | 24 |
| 1.3.2 一维势阱的量子透射 | 26 |
| 1.3.3 δ 势阱与势垒的透射 | 27 |
| 1.4 单阱定态微扰的能级分裂 | 29 |
| 1.4.1 非简并态微扰理论 | 29 |
| 1.4.2 定态简并微扰理论 | 31 |
| 1.4.3 简并与非简并微扰的例题 | 32 |
| 1.5 含时微扰的量子跃迁 | 36 |
| 1.5.1 含时微扰的基本方程 | 36 |
| 1.5.2 状态跃迁几率 | 38 |
| 1.5.3 含时周期微扰的共振跃迁 | 39 |
| 1.5.4 光跃迁的测不准关系 | 39 |
| 1.6 单量子阱光吸收和发射的初步量子理论 | 40 |
| 1.6.1 爱因斯坦的光发射与吸收原理 | 40 |
| 1.6.2 平衡态三种跃迁几率的公式推导 | 41 |

| | |
|---------------------------------|-----------|
| 1.6.3 受光照射的原子体系量子跃迁 | 42 |
| 第二章 固体物理基础..... | 45 |
| 2.1 固体原子周期排列的空间描述 | 45 |
| 2.1.1 晶体原子的几何空间描述 | 46 |
| 2.1.2 晶胞、晶面的矢量表示 | 48 |
| 2.1.3 晶体的对称性 | 50 |
| 2.2 倒格矢与布里渊区 | 55 |
| 2.2.1 倒易空间的晶格描述 | 55 |
| 2.2.2 布里渊区 | 56 |
| 2.3 晶格振动的量子论描述 | 57 |
| 2.3.1 简谐振动与热容量的量子理论 | 57 |
| 2.3.2 爱因斯坦和德拜的热容量理论 | 60 |
| 2.3.3 晶格线性微振动的格波解、光学支与声学支 | 61 |
| 2.4 固体电子运动的量子论描述 | 65 |
| 2.4.1 晶体价电子运动的理论模型 | 65 |
| 2.4.2 单电子近似与布洛赫波 | 66 |
| 2.5 准自由电子近似 | 66 |
| 2.5.1 定态微扰 | 67 |
| 2.5.2 简并微扰 | 69 |
| 2.5.3 能带与布里渊区 | 71 |
| 2.6 固体能带理论的启发性概念 | 74 |
| 2.6.1 电子运动的准经典粒子模型 | 74 |
| 2.6.2 能态密度与费米面 | 76 |
| 2.6.3 外场作用下的准经典粒子（有效质量概念） | 76 |
| 2.6.4 导体、绝缘体和半导体的能带区别 | 77 |
| 2.6.5 导电机制的定性讨论 | 78 |
| 2.7 金属电子论的基本问题 | 79 |
| 2.7.1 单电子近似模型 | 79 |
| 2.7.2 金属电子的费米分布 | 80 |
| 2.7.3 低温费米能级 | 81 |
| 2.8 光场作用的固体 | 81 |
| 2.8.1 固体介质极化 | 81 |
| 2.8.2 光的散射现象 | 83 |
| 2.8.3 光的吸收 | 83 |
| 2.8.4 激子 | 85 |
| 第三章 半导体物理基础..... | 87 |
| 3.1 半导体能带结构特性 | 87 |

| | |
|------------------------------------|------------|
| 3.1.1 带隙与带边有效质量 | 87 |
| 3.1.2 紧束缚电子模型的能带理论 | 91 |
| 3.1.3 常见半导体的能带结构 | 93 |
| 3.2 布里渊区与能带、杂质能级 | 96 |
| 3.2.1 布里渊区与能带 | 96 |
| 3.2.2 杂质能级 | 98 |
| 3.3 半导体载流子统计分布 | 100 |
| 3.3.1 导带的状态密度 | 100 |
| 3.3.2 载流子统计分布的玻尔兹曼近似 | 101 |
| 3.3.3 本征激发 | 101 |
| 3.3.4 杂质激发 | 103 |
| 3.3.5 N型杂质半导体的讨论 | 104 |
| 3.3.6 简并半导体 | 106 |
| 3.4 外场作用的半导体 | 109 |
| 3.4.1 迁移率和电导率 | 109 |
| 3.4.2 非平衡载流子的扩散与复合 | 110 |
| 3.4.3 强电场效应、耿氏效应 | 112 |
| 3.4.4 朗道(Landau)能级与量子霍耳效应 | 115 |
| 3.5 半导体表面与界面表面电场效应 | 118 |
| 3.5.1 表面与界面能带结构 | 118 |
| 3.5.2 表面电场效应 | 119 |
| 3.6 半导体表面PN结与异质结 | 125 |
| 3.6.1 半导体PN结载流子分布 | 125 |
| 3.6.2 电场作用下PN结 | 127 |
| 3.6.3 异质结半导体 | 129 |
| 3.6.4 异质结半导体的调制掺杂(MD) | 134 |
| 3.7 半导体的光学性质 | 135 |
| 3.7.1 半导体极化的Kramers-Kronig公式 | 136 |
| 3.7.2 带间吸收 | 138 |
| 3.7.3 其他共振吸收 | 141 |
| 第四章 超晶格平面薄膜的电子运动 | 147 |
| 4.1 方形沟道势阱的二维电子气 | 147 |
| 4.2 三角沟道势阱的二维电子气 | 150 |
| 4.2.1 三角势阱 | 150 |
| 4.2.2 三角势阱函数的自治解 | 153 |
| 4.3 电场作用下的二维电子气 | 156 |
| 4.3.1 二维电子气的空间图像 | 156 |
| 4.3.2 电流密度公式 | 157 |

| | |
|---------------------------------------|------------|
| 4.3.3 散射的分析 | 160 |
| 4.4 二维电子气的定域态 (Localized State) | 160 |
| 4.4.1 定域态的产生 | 160 |
| 4.4.2 迁移率边能级 E_c 导电和变程跃迁导电 | 161 |
| 4.5 超晶格薄膜激子运动 | 164 |
| 4.6 磁场中的二维电子气 | 167 |
| 4.6.1 磁量子化和磁阻振荡 | 167 |
| 4.6.2 二维电子气的朗道能级展宽 | 168 |
| 4.6.3 二维电子气的朗道能级态密度 | 169 |
| 4.7 二维电子气的量子霍尔效应 | 170 |
| 4.7.1 经典霍尔效应 | 170 |
| 4.7.2 量子霍尔效应 | 171 |
| 4.7.3 二维环的量子论解释 | 173 |
| 第五章 超晶格垂直方向电子运动 | 176 |
| 5.1 垂直平面电场作用下的激子运动 | 176 |
| 5.2 电场作用下激子的量子约束效应 | 178 |
| 5.2.1 红移 (向低能移动) 斯塔克效应 | 178 |
| 5.2.2 电场作用下的束缚能 | 181 |
| 5.2.3 蓝移万厄尔一斯塔克效应 | 185 |
| 5.3 量子共振隧穿和超晶格微带输运 | 187 |
| 5.3.1 量子共振隧穿 | 187 |
| 5.3.2 垂直界面量子输运的基本概念 | 189 |
| 5.4 相干隧穿与传递矩阵 | 189 |
| 5.5 顺序隧穿和巴丁传递哈密顿方法 | 196 |
| 5.5.1 巴丁传递哈密顿方法 | 196 |
| 5.5.2 顺序隧穿理论 | 198 |
| 5.6 空穴与不同谷间隧穿 | 199 |
| 5.6.1 空穴隧穿 | 199 |
| 5.6.2 谷间隧穿 | 201 |
| 5.6.3 二维 (2D) 至二维 (2D) 电子隧穿 | 203 |
| 5.7 磁场和电场中的电子共振隧穿 | 204 |
| 5.7.1 磁场中隧穿过程 | 204 |
| 5.7.2 电场作用的隧穿过程 | 206 |
| 5.7.3 共振隧穿双稳态 | 207 |
| 5.8 超晶格微带输运 | 209 |
| 5.8.1 低场下的微带输运 | 210 |
| 5.8.2 强场下的微带输运 | 212 |

| | |
|---|-----|
| 第六章 超晶格量子阱的光学应用与低维超晶格..... | 215 |
| 6.1 引言 | 215 |
| 6.1.1 低维小量子系统 | 215 |
| 6.1.2 超晶格量子阱的器件应用 | 216 |
| 6.1.3 超快光学现象 | 217 |
| 6.2 超晶格量子阱的光谱特性 | 220 |
| 6.2.1 吸收光谱实验 | 221 |
| 6.2.2 激子光谱 | 221 |
| 6.2.3 激子的饱和吸收 | 223 |
| 6.2.4 室温荧光特性 | 223 |
| 6.2.5 其他光谱特性 | 223 |
| 6.3 超晶格量子阱激光器原理特性 | 224 |
| 6.3.1 量子阱激光器的工作原理 | 225 |
| 6.3.2 量子阱激光器的特点 | 226 |
| 6.4 超晶格量子阱激光器的结构特性 | 229 |
| 6.5 量子阱级联 (QCL) 激光器 | 231 |
| 6.5.1 QCL 单元芯片的原理结构 | 232 |
| 6.5.2 QCL 的制作与运行机制 | 232 |
| 6.5.3 QCL 的光功率与光谱特性 | 233 |
| 6.5.4 量子阱级联激光器 (QCL) 的优点 | 234 |
| 6.6 低维超晶格的工艺与实验 | 234 |
| 6.6.1 低维超晶格的制造工艺 | 234 |
| 6.6.2 低维超晶格实验 | 236 |
| 6.7 低维超晶格的电子结构 | 237 |
| 6.7.1 量子无限深球势阱 | 237 |
| 6.7.2 一维超晶格 | 239 |
| 6.8 量子点激光器 | 240 |
| 6.8.1 量子点激光器 (Quantum Dot—QD) 的提出 | 241 |
| 6.8.2 QD 激光器的“原子点阵”方法 | 241 |
| 6.8.3 QD 激光器的 SOG 法 | 242 |
| 参考文献 | 244 |

绪 论

1. 超晶格量子阱的物理背景

20世纪70年代在半导体物理研究的基础上，提出了超晶格量子阱的概念，正如黄昆先生所说：“经过20多年的发展，它已由一个研究专题发展成为一个广阔的研究领域，代表着半导体集中发展的主流。”

超晶格量子阱概念的提出，在物理学上具有两大突破：第一个突破是把量子物理的研究范围拓宽到更大的尺寸。我们知道20世纪初提出的量子论和量子力学理论，是以原子尺寸(0.1 nm量级)所产生的波粒二象性及量子化规律为其研究范围。然而70年代发现的超晶格量子阱是在介质周期性薄层(10 nm量级)内出现量子化的电子运动规律，即几十到一百个原子层尺寸范围上仍有量子化运动规律出现，由于量子尺寸的扩大，从而产生一系列令人惊奇的量子物理现象，为后来的光电子技术发展提供了新的物理基础，也为量子物理的应用开阔了视野，这正是近20多年超晶格量子阱物理及其应用迅速发展的根本原因所在；第二个大突破是在人类历史上第一次出现人工设计晶体结构并制造周期性晶体。我们知道晶体的突出特点是原子点阵的周期性排列，正是这种周期性的排列结构，使电子运动出现一系列的量子化运动规律，但传统的晶体周期性都是重复或修补天然的周期性，不存在人工设计周期性问题，并且晶格周期性常数是恒定的常数，只是一个原子层的尺寸，点阵的排列几何形状也是恒定的，不可改变的；而超晶格量子阱晶体是由人工设计的大尺寸周期，称为薄层，是几十到上百个原子层，在如此大的周期下，电子运动又出现新的量子化现象，这种在大尺寸下出现的量子化运动现象称为超晶格量子阱。因此超晶格量子阱现象的发现和概念的提出，既是量子物理的突破，也是人工晶体材料工艺的一大发现，开辟了人工设计与制作晶体结构的新途径。

超晶格量子阱的发现和概念提出，其深刻的物理背景应该是20世纪量子物理和凝聚态物理在半导体方面的研究和发展，但是归根结底是量子物理的发展。我们知道，量子物理是20世纪物理学两大创举之一，在量子物理理论创立的同时，以晶格和晶胞为基础的固体物理，很快形成了以晶格原子点阵为基础的固体量子理论，成功地解释了固体低温比热容问题，并在价电子公有化运动的基础上提出了原子键合概念和布洛赫波的概念，进而形成了固体能带的理论，成功地解释了绝缘体、半导体和导体的区别。但是能带理论最卓越的贡献是半导体，它比较彻底地解决了本征半导体和杂质半导体的电子运动机制，导致20世纪50年代开始的电子技术开发。当我们欢呼60~70年代电子技术来临及研究成果时，首先应想到的是能带理论所奠定的物理基础，直到20世纪末的电子技术、光电子技术、信息技术，乃至当今信息社会的灿烂夺目的硬件技术，都植根于固体物理的能带理论，沿着这样一个思路追本溯源，20世纪末科学技术爆炸的烟花都会纳入20世纪物理学研究的总渠道之中。这正如中科院甘子钊院士在《世纪之交的物理学》中所言：

20世纪即将过去，物理学的革命，这场革命推动的整个自然科学和应用技术的伟大变革，以及这些变革对人类社会的影响，将作为这个世纪的一个重要标志而载入史册。这段令人神往的历史，给正处在世纪之交的我们以什么样的启示呢？

首先的启示是：作为研究物质结构和运动的基本规律的物理学，总是生机勃勃、不断地开辟自己前进的道路的。1803年道尔顿提出了近代的原子论，认为世间万物都是由几十种不同种类的原子（那时只认识到30来种）组成的。经过近一个世纪多方面的研究和争论，科学界接受了和发展了这个学说。到19世纪60年代，人们发现的元素的数目增到60多种，而且还认识到不同元素的性质是有内在联系的，门捷列夫的周期律描述了这种联系。19世纪末，物理学家们发现了电子、 α 粒子、放射性、X射线……发现原子是可以改变的，原子不是物质构成的最小单元。20世纪初卢瑟福建立了原子结构的“行星”模型，探讨原子结构模型和经典物理学之间的矛盾，导致了量子力学的诞生，产生了现代原子、分子物理、凝聚态物理、原子核物理……历史也许有某种类似性。在这个世纪之交，物理学又正在进入一个新的层次。20世纪50年代，人们找到作为构成物质的基石的基本粒子有30来种，也认识到它们之间相互作用和相互转化。探索这些“基本”粒子的更深层次的构造的努力，近30年来取得十分辉煌的成就。三代夸克和三代轻子的粒子模型、电弱统一理论和量子色动力学，这种被称作粒子物理的标准模型的建立以及它在各方面的成功，标志着物理学正在进入物质世界的一个更深的层次，毫无疑问这将是物理学历史上一个具有划时代意义的大事。但是，大多数的物理学家都会同意，从本质上说，目前的标准模型还是一个唯象的模型。在欢呼它取得的多方面的胜利时，也要看到同时提出了一系列本质性的问题。也许可以说，进入这个新层次将带来的最本质的新的物理，还没有来到我们中间。19世纪末的物理学家没能猜测到，进入比原子更深层次的探索，会在什么时候和在哪点上带来新的物理，20世纪末的人们也不能奢望会比前辈高明多少！

20世纪物理学的革命，表现出人类理性思维的伟大胜利。狭义相对论，特别是广义相对论，以它深邃的思考、严整的形式和美丽的表述，震撼着一代又一代的物理学工作者的心灵。但是，爱因斯坦也在他那无与伦比的思考导致的宇宙模型面前困惑了。感谢近40多年来一大批物理学家和天文学家辛勤的努力和非凡的勇气，这个难以想象的革命性的关于宇宙的概念和图像建立起来了，并得到科学界多数人的认同。在大致150多亿年前，宇宙从一个具有无限大的密度和无限大的时空曲率的点开始了。人们猜想，在宇宙膨胀，密度和温度降低中，在 10^{-44}s 时，重力相互作用和其他相互作用分离开来；到 10^{-36}s 时，强相互作用和电弱相互作用分离；直到 10^{-10}s 时，弱相互作用才与电磁相互作用分离，世界变成了我们现在所处的有四种基本相互作用的世界。到 10^{-6}s 时，夸克开始结合成强子，也许应当说，只有从此之后的物理才是当代物理学家可以比较有把握来谈论的。直到 10^{12}s （也就是3万年）后，原子才开始出现。这样一个综合了亚核子尺度（小于 10^{-14}cm ）的物理和宏观尺度（大于 10^{24}cm ）的物理的宇宙演化模型的建立，可以说是人类认识史上一个最具有革命性的、划时代的伟大事件，当代人还难以完全理解它的意义。这个宇宙学的标准模型和近年来天体物理学家取得的辉煌的成就，在物理学的面前提出了十分严峻的具有本质的挑战。如何理解这样有限而无界的时空和它的奇点？什么是在这样演化中的物质和运动规律？为什么宇宙学中有那么多“巧合”？总之，面对着如此壮观而又如此神奇的宇宙之谜，除了由衷的赞美和敬佩，人们不禁想起爱因斯坦的话：“自然界最不可理解的就是它竟然可以理解！”

20世纪物理学的发展给我们的又一个教益是：物质世界是有层次的，反映物质世界的物理学规律也是有层次的。每一层次的物理都植根于更深层次的物理学。但是，每个层次的物理都是在真实的意义上不可穷尽的。在大自然千姿百态的丰富性面前，那些断言某某学科将不会有发展的说法总是被事实所粉碎。经典力学、经典电动力学并不因为量子力学、量子电动力学的发展而被排斥出物理学，近年来我们还不停地学习它们新的、有深刻意义的进展。光学和凝聚态物理学半个世纪来的巨大的、令人应接不暇的发展提供了最能说服人的例子。也许人们常常在赞颂它们实际应用上的威力的同时，不够强调它们在物理学学科上的意义。但如果我们想到在当代粒子物理和宇宙学中最重要的观念，如相变、对称性破缺、拓扑性缺陷、红外发散等等，都首先来自凝聚态物理学，而当代凝聚态物理又都广泛地而且本质地使用量子场论的语言和技术时，我们就会确信物理学的丰富性、多样性和统一性，“只有一个物理学”！

2. 超晶格量子阱的实验发现

1969年美国IBM公司托马斯J.瓦特逊研究中心(IBM Thomas J. Watson Research Center)两位半导体物理学家江崎(L. Esaki)和朱兆祥为研究双重或多重势垒的共振隧道效应，设想在异质结界面长周期改变组分或杂质，从而在垂直界面方向上形成一个远大于晶格尺寸的超晶格势，进而改变了基质材料的能带结构，由于超晶格势的周期比基质材料的晶格大很多，基质能带的布里渊区被分成许多小区，因此导带和价带被一些新的禁带隔开而形成狭窄的子带。采用路径积分的方法，计算子带中电子运动行为，发现在超晶格势作用下，会出现反常电流—电压特性，包括负阻效应。1972年用MBE(分子束外延)技术首先生长了GaAlAs超晶格异质结半导体，并且验证了负阻效应(图1)的存在，也检证了二维(2D)晶体和三维(3D)晶体能带的差别，如图2所示，三维晶体是抛物曲线，二维晶体的电子态被隔离三段，即图中的ab, cd, ef三个子带。

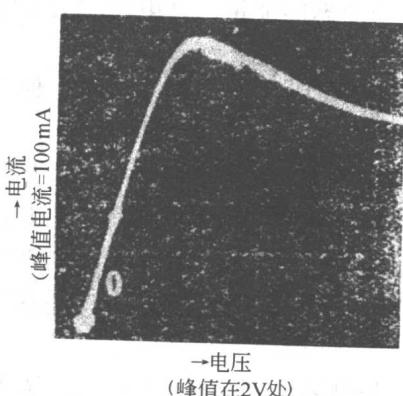


图1 70nm周期超晶格电流—电压特性

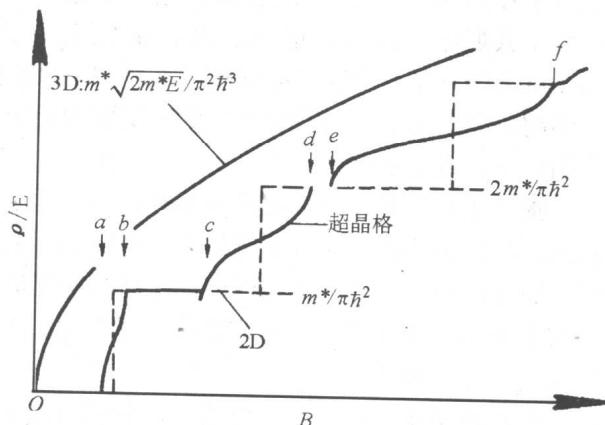


图2 超晶格三维(3D)和二维(2D)态密度比较

1973年朱兆祥和江崎又计算了双重、三重和五重超晶格势垒的电子能量曲线，得到如图3的曲线图，可见双势垒、三重势垒和五重势垒的电子运动势阱分为单阱、双阱和四阱，曲线出现单峰、双峰和四峰，这都是共振隧道效应的出现。

在1974年张立纲、江崎和朱兆祥在实验上观察到了双势垒(单阱)的共振隧道效应，如图4所示。

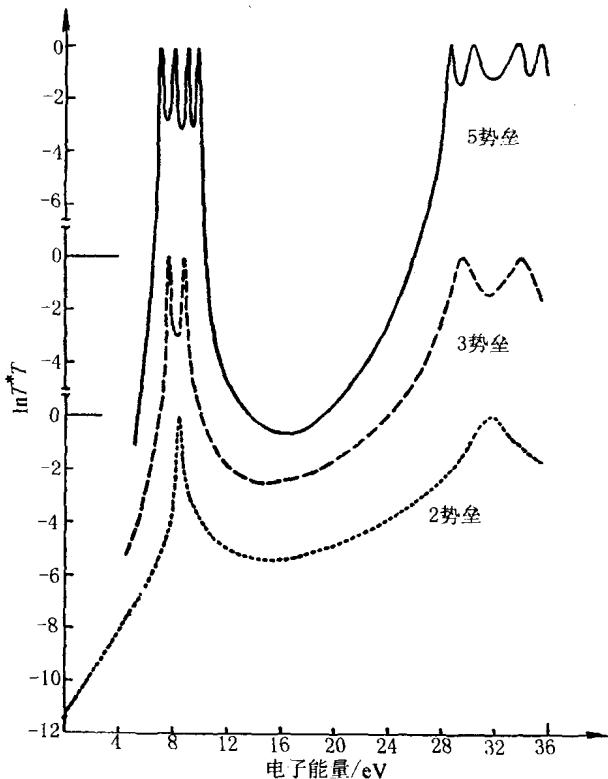


图3 传输系数与电子能量关系图

双势垒电流一电压特性 ($I-V$) 和 $dI/dV-V$ 特性，阱宽为 5nm，势垒用 $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ 制做，势垒各宽 8nm，方框插图标出二个束缚态 E_1 和 E_2 ，当外加电压使量子能级跟束缚态拉平时发生共振如 (a)、(c) 所示。从共振曲线可以得到束缚态的能量，是电流峰值处电压的一半。后来的一系列实验也都证实了 E_1 和 E_2 的理论曲线。

上述超晶格概念的提出和超晶格势阱实验的验证，及后来 20 多年的研究成果，使我们不难得出以下几点启示：

(1) 揭示了半导体乃至所有晶体都存在大尺寸（或称超晶格尺寸）的量子效应，从而把量子物理和凝聚态物理的研究引导进入一个新的研究领域，这就是 20 世纪末提出的介观物理体系 (Mesoscopic Physics System)。介观物理是在凝聚态物理中的各种局域化物理现象研究，特别是局域量子现象的研究基础上提出的，半导体中的超晶格量子阱研究是最典型也是最鲜明的局域化理论。

(2) 超晶格量子阱概念提出以后，半导体物理学家为设计各种超晶格结构，探索新结构下的新奇物理现象，做了大量的理论和实验研究工作，这些工作的一个重要启示就是超晶格的量子态跟人工设计的周期性结构密切相关，或者说可以从结构设计中获得理论构想的束缚态。这就为我们提供两点启发：第一是可以人工设计新结构，并获得过去天然晶体所不存在的新物理现象，从而突破了只探索天然晶体物理现象的限制，开创了主动地设计和制造新结构新现象的新局面，使半导体器件技术由“杂质工程”进入到“能带工程”或物理特性的“裁剪工程”。第二是借助分子束外延技术 (MBE) 形成了材料制造的建筑学，超晶格量子阱

跟分子束外延技术的结合，使晶体材料的制造突破了已有的宏观物理条件（温度、压强、相变点、居里点、介晶等），进入到以原子为最小“砌块”的微观加工技术领域。

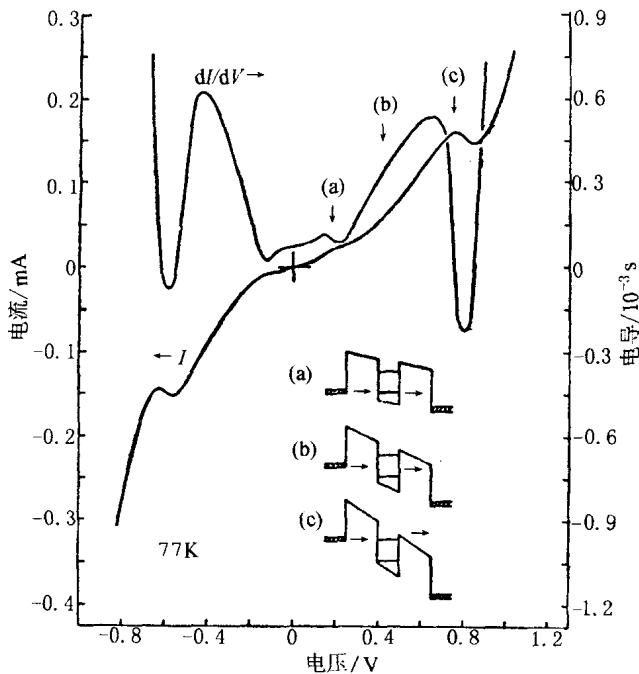


图 4 双势阱结构电流—电压和电导—电压特性

(3) 超晶格量子阱是一个新的物理体系，出现许多新奇的物理现象，材料结构的设计又有分子束外延 (MBE) 和金属有机化学气相沉积 (MOCVD) 等高精密的加工制造技术，这就预示着一系列新的高性能光电子器件的产生。在过去 20 多年里已经出现了高性能的量子阱激光器、共振隧穿器件、光双稳器件、低维量子结构激光器、光电探测器和高电子迁移率晶体管等新型高性能的光电子学器件，特别是当前光电信息传输中所需的高速度、大容量、低误码率的发射器、调制器和探测器、转换器等都有希望由超晶格量子阱器件中获得解决。

3. 超晶格量子阱的能带结构原理与分类

自从 1970 年江崎和朱兆祥提出超晶格量子阱的概念以后，80 年代分子束外延和金属有机化学汽相沉积技术及各种刻蚀技术的突破性进展，至今人们已经能制造出各种各样超晶格量子阱材料。

量子阱的概念并不陌生，在量子力学中就已阐明是微观粒子产生量子化能级的势场，通常把势场作用边界和几何形状清楚的称量子阱，在固体物理中又把一维周期性晶格对称有化电子作用模拟为周期性势场，周期是晶格点阵常数（或晶格常数 a ），一个周期包括阱宽 b_1 和势垒宽 b_2 ， $a = b_1 + b_2$ ，在这样周期性势场（多量子阱）作用下，在单阱内的量子化能级弥散为能带，但是超晶格量子阱中的人造周期比固体物理的晶格大几倍到几十倍，是人工制作（晶体生长）的一维超薄层介质重复迭层，同样出现能量量子化现象。实际上是借用晶体的周期性概念，也是一维方向（薄层生长方向，通常记 z 方向）的大于晶格常数的周期，因此得名超晶格量子阱。

按上述超晶格量子阱概念，在有效质量的假定下，导带底附近电子（也适用价带顶的空穴）满足有效质量的波动方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) \right] F(r) = EF(r) \quad (1)$$

式中 m^* 为电子（或空穴）有效质量， $V(z)$ 是超晶格生长方向 (z 方向) 的有效势函数， $F(r)$ 是有效质量量子包络函数，即波函数。相邻薄层两种材料的导带底在界面处所形成的能带突变值称“带阶”（band offset），由波动方程可见，电子只受到 z 方向 $V(z)$ 的约束，而在平行界面的 xy 方向是自由的，实际上是准自由的，把电子质量换成有效质量，就如同三维晶体中运动一样是布洛赫自由波动。因此包络函数 $F(r)$ 写为：

$$F(r) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{ik_{||} r_{||}} f(z) \quad (2)$$

式中 $k_{||}, r_{||}$ 为 xy 平面上的波矢和位置坐标， $f(z)$ 是 z 方向调制振幅函数，满足：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] f(z) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*} \right) f(z) \quad (3)$$

式中 m^* 是各向同性的， $\hbar^2 k_{||}^2 / 2m^*$ 为电子在 xy 平面上“自由”运动的能量本征值，呈抛物型， $k_{||}^2 = k_x^2 + k_y^2$ 。对振幅方程(3)，由于 $V(z)$ 的函数形式不同可有不同的解法，这在第一章的量子力学准备中已做了介绍，为简单说明问题起见，这里取无限深势阱：

$$V(z) = \begin{cases} 0 & 0 < z < w \\ \infty & z \leq 0 \text{ 或 } z \geq w \end{cases} \quad (4)$$

式中 w 是 $V(z)$ 势阱宽，按量子力学结果（见 1.2 节）其解为：

$$E - \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{2m^2} \left(\frac{n\pi}{w} \right)^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$f_n(z) = \sqrt{\frac{2}{w}} \sin \frac{n\pi}{w} z \quad (5)$$

可见，量子阱中能量为 $E = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{w} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*} = E_{zn} + E$ ，由平面运动和 z 方向受 $V(z)$ 约束运动的二部分能量组成，由于三维晶体的周期性势阱相互作用形成能带，那么 E 实际是导带底（或空穴价带顶）的能量取值，在超晶格量子阱一维势 $V(z)$ 的约束下，使 E 受到 $E_{zn} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{w} \right)^2$ 量子化的分割成为小能量区间称子带（Subband），这就是超晶格量子阱能带结构特点。

下面再讨论 z 方向量子化能级 E_{zn} 展宽为微带和小布里渊区的问题。

由第二章的固体能带理论讨论可知：(1) 固体能带形成的根本原因是周期性量子阱的互

相作用，单阱波函数互相渗透，使单阱的能级展宽为能带；（2）能带的断裂点在布里渊区的边界，对一维方向，晶格常数为 a ， k_z 取值为 $-\frac{\pi}{a} < k_z < \frac{\pi}{a}$ 。

前面讨论超晶格周期为 L ，周期性量子阱相互作用，也会使 E_{nz} 单量子阱能级展宽为窄能带，称微带，设第 i 个量子阱中心坐标为 z_i ， z 方向的布洛赫波为：

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i^N e^{ik_z z_i} f(z - z_i) \quad (6)$$

z 方向的第一布里渊区内 k_z 取值范围为 $-\pi/L < k_z < \pi/L$ ，相互作用势为 Δ 时，微带能量为：

$$E = E_{nz} + 2\Delta \cos k_z L \quad (7)$$

微带的宽度为 4Δ 。如果 $L = Na$ ， N 为整数，可见超晶格的布里渊区（称小布里渊区）是三维晶体的 $1/N$ 倍，则超晶格能带是体材料能带折叠而成，图 5 为超晶格能带与体材料能带折叠示意图，图中 $d = L$ 。

从以上的讨论可以看出，超晶格量子阱的电子运动能带，由于 z 方向的微带效应，在体材料能带基础上断裂为子能带。这是超晶格量子阱能带结构的突出特点，也是超晶格量子阱物理的理论基础。

至今为止所制作的超晶格量子阱可分为组分、掺杂、应变和低维超晶格几类，但分类的标准各不同。

(1) 组分超晶格，主要是不同半导体材料或半导体化合物生成的超晶格量子阱结构。

(2) 按能带相对位置分为三类，这是江崎最早所作的分类，这种分法对超晶格物理问题研究很方便，如图 6 所示。

图中 (a) 为第一类：材料 A 的禁带在 B 材料禁带中，所以不论电子或空穴，A 总是势阱，B 总是势垒，电子和空穴都被约束在 A 中，迁移率很大；

第二类：图中 (b) (c)。A、B 两种材料，导带和价带完全错开，A 比 B 低，因此 A 是电子势阱，B 是空穴势阱，两种载流子分别约束在两种材料中，迁移率较低；

第三类：图中 (d)。A、B 中有一种是零带隙，如 HgTe/CdTe 超晶格，它们导带在价带顶之下，在超晶格中电子有效质量为负值，将形成界面态。

(3) 应变超晶格。两种材料晶格常数失配 $< 7\%$ ，可以通过材料应变补偿晶格失配。

(4) 组分渐变和调制掺杂超晶格。通过逐渐改变组分或调制掺杂，控制能带结构的形状，如抛物型、锯齿型等。

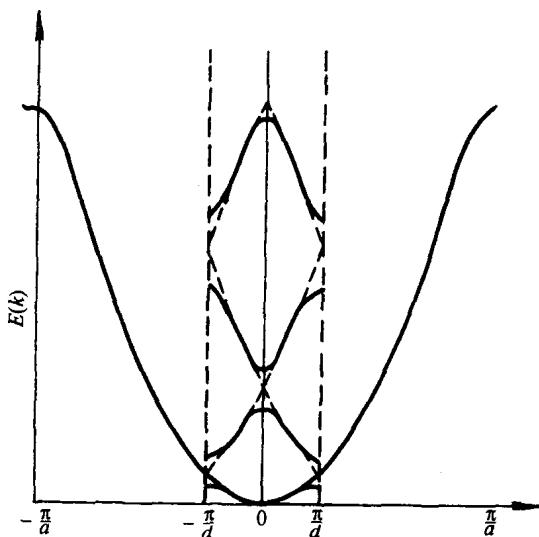


图 5 超晶格和体材料能带示意图