

掺杂超晶格——“NIPI”晶体

黄和鸾

(辽宁大学物理系)

一、引言

当前，用分子束外延技术可生长一种新型的掺杂超晶格，它是由掺有n型和P型杂质的超薄层与本征层相间组成的周期性结构，称为“NIPI”晶体(此处的N与P分别代表N型层和P型层，I代表本征层)。图1(a)给出了GaAs掺杂超晶格的示意图。图中的 d_n 、 d_p 和 d_i 分别是n型和P型掺杂层及本征层的厚度。超晶格的周期为NIPI各层厚度之和，即

$$d = d_n + d_p + 2d_i, \quad (1)$$

其数值可达几百到几千Å。

任何具有周期性掺杂分布，而且满足n型和P型相间排列的系统，都将表现出与图1(a)结构性地类似性质。除了周期 d 外，每个掺杂层内的施主和受主浓度，即 $n_D d_n$ 和 $n_A d_p$ 也是标志“NIPI”晶体的重要参量。这类“NIPI”掺杂超晶格与我们通常熟悉的异质结超晶格系统不同，它不包含任何界面，因此并不存在任何与界面有关的问题。掺杂超晶格在结晶学上只是受到相当小量掺杂质的扰动(掺杂质的典型值一般在 10^{17} — 10^{19} cm^{-3} 范围)。在这种类型的超晶格中，周期势是固定的离化杂质产生的静电势，它部分地受到分别限制在n型和P型掺杂层内的可移动的电子和空穴的补偿。

由于内部空间电荷场的作用，电子和空穴总是分别堆积在n层和P层。如果超晶格的周期足够大，而且温度也比较低，则可存在与平衡时电子和空穴浓度有较大偏离的亚稳态。由于离化杂质的电荷受到补偿，周期势的振幅随载流子浓度的增加而逐渐减少。这种周期势振幅

的大小可超过纯半导体基态能隙的一半，因此，具有掺杂超晶格的晶体，实际上是代表一种具有可变带隙和可变载流子浓度的晶体。由于具有这些特殊的性质，无论是对于科学研究，还是对器件应用，都开辟了一个新的非常重要的研究领域。

二、GaAs掺杂超晶格的电子性质

Döhler^[1,2]于1972年在理论上提出“NIPI”掺杂超晶格的模型，目前已经用分子束外延技术做出了GaAs掺杂超晶格^[3,4]，而且又通过实验，证实了理论上预言的性质的可靠性。下面主要介绍GaAs掺杂超晶格在垂直于层的方向上实空间的带结构，如何适当地选择设计参数构成这种带结构，如何由电激发或光激发调制空间电荷势和带结构。

1. GaAs掺杂超晶格的空间电荷势与电子态

这里介绍的空间电荷势的计算做了如下两点近似：

(1) 如果组成“NIPI”结构的各层足够厚，就可以忽略在垂直于层方向上由于运动的量子化而引起的任何亚带效应。

(2) 不进行空间电荷分布的自治计算，而是假设由于自由载流子的补偿作用，在宽度为 d_n^0 和 d_p^0 的中心区域严格中性化，而在宽为

$$2d^+ = d_n - d_n^0, \quad 2d^- = d_p - d_p^0 \quad (2)$$

的区域，杂质的空间电荷未被补偿。

在n层和P层中，具有二维电子和空穴的浓度分别为

$$n^{(2)} = n_D d_n^0, \quad p^{(2)} = n_A d_p^0. \quad (3)$$

由于宏观电中性要求

$$n_D d^+ = n_A d^-, \quad (4)$$

于是得到二维载流子浓度之间的关系式为

$$n^{(2)} = p^{(2)} + n_D d_n - n_A d_p. \quad (5)$$

求解泊松方程：

$$\frac{dF(Z)}{dz} = 4\pi\rho/\epsilon, \quad (6)$$

可直接求出内场 $F(Z)$, 式中 ρ 为空间电荷密度。图 1(d) 为电场分布图形。空间电荷势与电场的关系为

$$\frac{dV(Z)}{dz} = -eF(Z), \quad (7)$$

如图 1(e) 所示。

在 $-\frac{d}{2} < Z < \frac{d}{2}$ 的范围内, 周期性空间电荷势 $V(Z)$ 分以下三个区域：

(1) 在掺杂层的中性区域: $V(Z)$ 为常数

$$V(Z) = \begin{cases} 0 & (\text{当 } |Z| < d_n^0/2 \text{ 时}), \\ 2V_0 & \left[\begin{array}{l} (\text{当 } (d - d_p^0)/2 < |Z| \\ < \frac{d}{2} \text{ 时}) \end{array} \right] \end{cases} \quad (8)$$

(2) 在离化杂质区域: $V(Z)$ 呈抛物线型。

$$V(Z) = \begin{cases} (2\pi e^2 n_D/\epsilon)(|Z| - d_n^0/2)^2 & (\text{当 } d_n^0/2 < |Z| < d_n/2 \text{ 时}), \\ 2V_0 - (2\pi e^2 n_A/\epsilon)[|Z| - (d - d_p^0)/2]^2 & [\text{当 } (d - d_p^0)/2 < |Z| < (d - d_p^0)/2 \text{ 时}], \end{cases} \quad (10)$$

(3) 在本征层内:

$$V(Z) = (4\pi e^2 n_D d^+)(d_n^+/2 + |Z| - d_n/2)/\epsilon \quad [(\text{当 } d_n/2 < |Z| < (d - d_p)/2 \text{ 时})], \quad (12)$$

式中 ϵ 是半导体的静电介电常数。空间电荷势的振幅为^[5]

$$\begin{aligned} 2V_0 &= V(d/2) - V(0) \\ &= (4\pi e^2/\epsilon)[n_D(d_n^+)^2/2 + n_A(d_p^-)^2/2 \\ &\quad + n_D d^+ d_i]. \end{aligned} \quad (13)$$

空间电荷势对导带和价带进行调制, 如图 1(e) 所示, 得到能带边缘为

$$E_c(Z) = E_c + V(Z), \quad (14)$$

$$E_v(Z) = E_v + V(Z), \quad (15)$$

其中

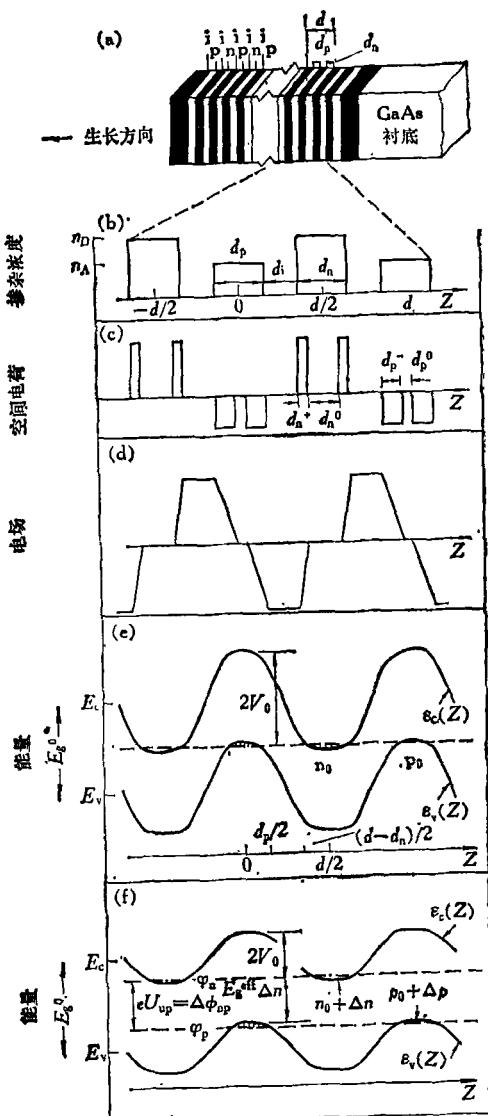


图 1 当层厚为 d_n , d_p 和 d_i , 周期为 d , 掺杂浓度分别为 n_D , n_A , 且 $n_i = 0$ 时, GaAs 掺杂“NIP1”超晶格

(a) 周期结构; (b) 掺杂分布; (c) 空间电荷分布; (d) 电场分布; (e) 各层内自由载流子浓度为 n_0 和 p_0 的基态, 具有零带隙(半金属)和共同的费米能级 ϕ ; (f) $n = n_0 + \Delta n$, $p = p_0 + \Delta p$ 的激发态, 准费米能级的劈裂为 $\phi_n - \phi_p = \Delta\phi_{np} = eU_{np}$

$$E_c = E_v + E_g^0. \quad (16)$$

可以看出, 掺杂超晶格的有效能隙, 也就是导带中最低的电子态与价带中最高的空穴态之差, 比未调制的体内值 E_g^0 小 $2V_0$,

$$\begin{aligned} E_g^{\text{NIP1}} &= E_c(Z=0) - E_v\left(Z=\frac{d}{2}\right) \\ &= E_g^0 - 2V_0. \end{aligned} \quad (17)$$

在垂直于层的方向上，周期性的空间电荷势引起能谱的量子化，因此自由载流子在动力学上代表准二维系统。平行于层的自由载流子的运动是自由的，在费米能级附近，具有足够大的自由电子浓度 $n^{(2)}$ ，其动能为

$$E_k = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_c}, \quad (18)$$

式中 m_c 是有效质量（包括二维多体修正）， k_{\parallel} 是平行于层的动量^[6]。在上述计算中，忽略了离化杂质势的任何散射以及由杂质的随机分布引起的势起伏。

在垂直于层的方向上，自由载流子的运动是量子化的，具有分立的能级 E_{ν} ($\nu = 0, 1, 2, \dots$)， ν 是各亚带的标志。在第 ν 个亚带中电子的能量为

$$E_{\nu}(k_{\parallel}) = E_{\nu} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_c}. \quad (19)$$

Döhler^[6] 采用哈特里近似完成了亚带能量的自洽计算，Döhler 等在文献[7]中做了包括交换和相关修正的精确计算，最近 Ruden 和 Döhler^[8] 用局域密度近似，对电子态做了自洽计算。

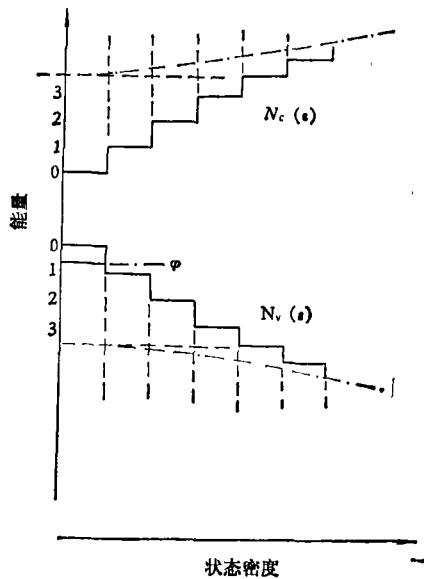


图 2 GaAs 摻杂超晶格的亚带状态密度

由所有亚带状态密度的叠加得到总的状态密度。在有效质量近似下，每一个亚带都贡献一个常数 $m_c/\pi\hbar^3$ 。图 2 是假设导带和价带具有相同的有效质量时，状态密度的图形。图中点划线是具有相同数目的随机掺杂分布时，未调

制的 GaAs 晶体的状态密度；阶梯状的分布是调制后 GaAs 摻杂超晶格的状态密度曲线。

当超格周期很长时，可达到准连续，此时与杂质的随机分布引起的势起伏相比，不同的亚带之间的能量间隔变得非常小，因此状态密度图形也不会有这种明显的阶梯状的跃变。不过，与均匀的未调制的体材料相比，状态密度之间的差别仍然是不可忽视的。

2. 三种类型的 GaAs 摻杂超晶格

从(8)–(13)式可以看出，可由掺杂浓度和各层的厚度来决定掺杂超晶格周期性的空间电荷势。因此，我们可以预先广泛地选择设计参数，得到各种类型的掺杂超晶格。例如，改变空间电荷势的周期、振幅和形状以及亚带的自由载流子数，利用分子束外延技术已经制成了三种类型的 GaAs 摻杂超晶格。

(1) 补偿型本征超晶格

在掺杂浓度较低、超格周期较短的情况下，空间电荷势的振幅 $2V_0$ 小于均匀体材料的带隙，在 n 层和 p 层内的掺杂浓度相等，即

$$n_D d_n = n_A d_p,$$

施主的所有过剩电子都与受主的空穴复合了，没有自由载流子浓度，费米能级在有效带隙的中部。这种结构就是补偿型本征超晶格，有效带隙为

$$E_g^{NIP1} \approx E_g^0 - 2V_0. \quad (20)$$

图 3(a) 是这种超晶格的导带和价带的边缘情况。

(2) n 型(或 p 型)超晶格

保持 $n_A d_p$ 不变，增加 $n_D d_n$ ，此时 p 层完全被耗尽了，p 层内没有自由空穴。根据宏观电中性条件，n 层内包含过剩电子浓度为

$$n_0^{(2)} = n_D d_n - n_A d_p. \quad (21)$$

费米能级处在导带内，这种掺杂超晶格材料为 n 型半导体。能带图形如图 3(b) 所示。如果保持 $n_D d_n$ 不变，增加 $n_A d_p$ ，则相应地得到 p 层内空穴浓度为

$$p_0^{(2)} = n_A d_p - n_D d_n. \quad (22)$$

费米能级在价带内，此为 p 型掺杂超晶格半导体。

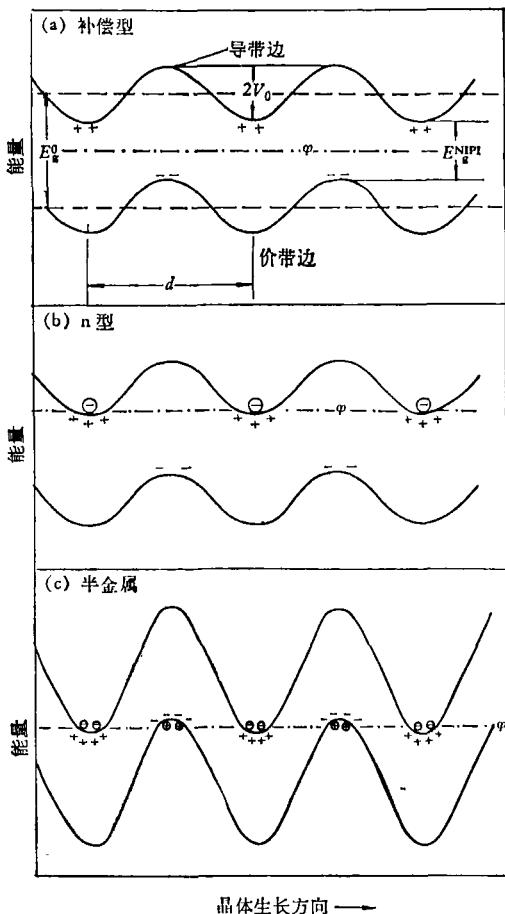


图 3 三种类型的掺杂超晶格导带和价带的边缘情况

(3) 掺杂超晶格“半金属”

当 $n_D d_n$ 和 $n_A d_p$ 都较大时, 超晶格势振幅达到极大值, 比未调制的体材料的能隙 E_g^0 还稍大, 因此不出现有效带隙。基态时, n 型层中有自由电子, p 型层中有自由空穴, 掺杂超晶格类似于“半金属”, 能带图如图 3(c) 所示。图中的 φ 为共同的费米能级。这种结构可以是 n 型的, 也可以是 p 型的, 与两种类型层内的掺杂选择有关, 分别称为重 n 型或重 p 型掺杂“半金属”。

图 4(a) 表示当 $n_A = n_D$, $d_p = d_n$ 时, GaAs 掺杂超晶格材料的类型与设计参数的关系。曲线 a 是补偿型本征超晶格结构的层厚与掺杂浓度的关系, 空间电荷势振幅 $2V_0$ 等于体带隙的一半; 曲线 b 表示从补偿型结构到“半金属”结

构的过渡, $2V_0 \approx E_g^0$; 曲线 c 是在“半金属”结构中每层内有自由载流子 $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 的情况。可直接计算这种“半金属”结构空间电荷层的宽度和每个 n 层或 p 层总的空间电荷与掺杂浓度的关系, 如图 4(b) 所示。这些例子说明, 由分子束外延技术可生长出具有我们所希望的电子性质的新型人造超晶格材料。

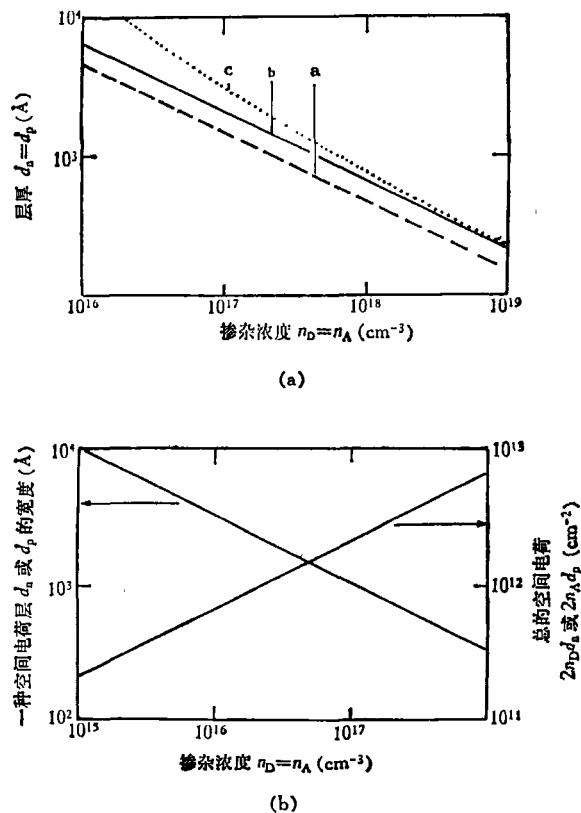


图 4 GaAs 掺杂超晶格的电子性质与设计参数的关系

(a) 材料类型与设计参数的关系; (b) 空间电荷层的宽度、空间电荷密度与掺杂浓度的关系

3. GaAs 掺杂超晶格的可调谐性

有几种可能的方法使 GaAs 掺杂超晶格偏离基态, 从而实现对 GaAs 掺杂超晶格的自由载流子和有效带隙的调谐。下面简要介绍目前已经完成的两种方法。

(1) 通过适当选择侧面电极, 向各层注入或抽取自由载流子, 如图 5 所示。加到 n 层和 p 层之间的电势差 eU_{np} 引起自由载流子浓度的变化, 准费米能级的劈裂直接对应于外加电势差

$$eU_{np} = \phi_n - \phi_p = \Delta\phi_{np}. \quad (23)$$

图 5 中的 n^+ 电极与 n 层形成欧姆接触, 与 P 型层绝缘; p^+ 电极与 P 型层形成欧姆接触, 与 n 型层绝缘。

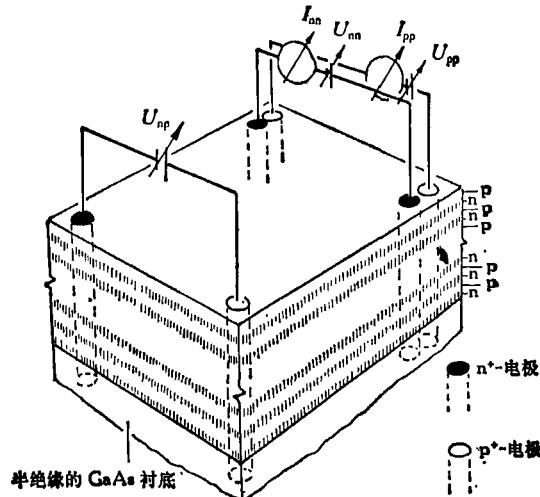


图 5 测量电子和空穴电导与外偏压关系的 GaAs 掺杂多层器件

Ploog 等^[9]利用选择电极同时测量了 n 层和 P 层内电导率的变化。由霍耳效应测量^[10]直接得到这种掺杂多层结构基态的电子迁移率 μ_n 和二维电子浓度 $n^{(2)}$ 。如果通过外加偏压 U_{np} 改变电子和空穴浓度 $n^{(2)}$ 和 $p^{(2)}$, 那么就可以在稳态观察到 n 层和 P 层准二维电导率 $\sigma_{nn}^{(2)}$ 和 $\sigma_{pp}^{(2)}$ 的相应调制, 加在 n^+ 和 p^+ 电极之间的电势差 eU_{np} 引起费米能级劈裂成电子的准费米能级 ϕ_n 和空穴的准费米能级 ϕ_p 。在正向偏压 ($+U_{np}$) 下, 注入的载流子部分地补偿了空间电荷, 引起空间电荷势的降低, 因而使有效带隙 E_g^{NPPI} 加宽, 如图 1(f) 所示。在负偏压 ($-U_{np}$) 下, 自由载流子被抽取, 只要有一种类型层完全被耗尽了, 就可以导致空间电荷势的增加。

图 6 表示 P 型半金属结构的二维载流子浓度(作为 eU_{np} 的函数)之间的关系, 图中给出了在三种偏压 ($eU_{np} \geq 0$) 下带边缘及电子和空穴准费米能级位置的调制情况。由外加电势差的符号来决定各层内空间电荷密度是否增加。这样, 就可以直接调谐 n 层和 P 层内的自由载流子浓度, 因而也就调谐了电导率。当 $eU_{np} < eU_{np}^{\text{th}}$

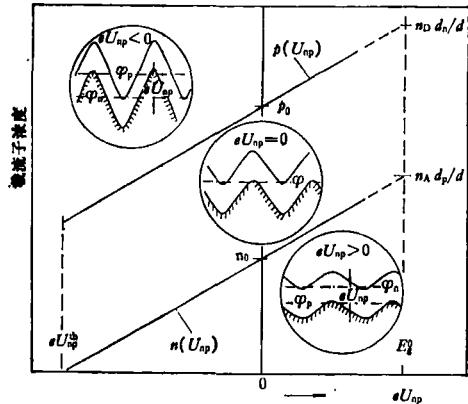


图 6 在 P 型掺杂超晶格半金属中的自由电子和空穴浓度与外加电势差 eU_{np} 的关系

时, n 层完全被耗尽, P 区的自由空穴浓度保持不变, 由体带隙 E_g^0 决定自由载流子注入的上限, 增加着的电子-空穴复合电流限制了准费米能级的劈裂。

(2) 通过光激发调制, 吸收电磁辐射, 产生电子-空穴对, 使自由载流子注入到 GaAs 掺杂超晶格。由于光跃迁矩阵元强烈地受周期性空间电荷势变化的影响, 所以掺杂超晶格的吸收系数(是光子能量的函数)与有效带隙有关, 因而也与准费米能级的劈裂有关。

测量光电导随时间的变化可决定掺杂超晶格的吸收系数。图 7 是一个典型的电子导随时间变化的曲线, 曲线明显地分为三部分: (1) 当 $t \leq t_1$ 时, 电导是个常数, 它对应着没有光激发时样品的基态值; (2) 当 $t > t_1$ 时, 电导迅速增加, 这是由于吸收光子产生电子-空穴对, 使自由载流子浓度增加的结果, 曲线的斜率单调

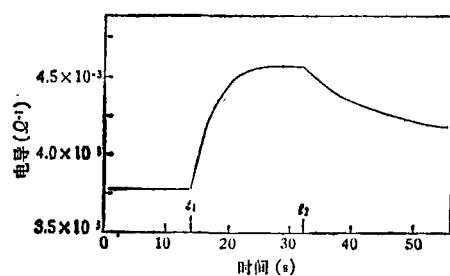


图 7 光电导随时间的变化曲线
($T = 4.2\text{K}$, $\hbar\omega = 1.473\text{eV}$, $\phi = 6 \times 10^{12}\text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$)

下降,一直到电导曲线几乎变平,这是由于吸收系数的减少和复合速率的增加引起的;(3)当 $t = t_2$ 时,停止光激发,由于过剩载流子的复合使电导下降,但未表现出指数关系。

带结构的可调性对 GaAs 摻杂超晶格的发光性质有强烈的影响,稳态载流子浓度的任何变化(光激发)都会引起发射线位置和强度的显著变化。当光子能量低于体带隙时,借助于光致发光的测量,可以分析 GaAs 摻杂超晶格过剩电子-空穴对跨越有效带隙的自发辐射复合。由于有效带隙减少了,可预料当光子能量远低于体材料的带隙时,也会出现发光。

“NIPI”超晶格晶体的特殊性质,吸引着人们去开创新的应用领域。特别是电致发光的可调性^[11]及其具有的高效率,可使我们能制造出一种可调谐的红外激光器,它能在 $1.2\mu\text{m}$ 以外

的适宜区域很好地工作。

参 考 文 献

- [1] G. H. Döhler, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **52**(1972), 79.
- [2] G. H. Döhler, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **52**(1972), 533.
- [3] G. H. Döhler and K. Ploog, *Prog. Crystal Growth Charact.*, **2**(1979), 145.
- [4] K. Ploog et al., *J. Electrochem. Soc.*, **128**(1981), 400.
- [5] G. H. Döhler et al., *Phys. Rev. B*, **23**(1982), 2616.
- [6] G. H. Döhler, *Surface Science*, **73**(1978), 97.
- [7] G. H. Döhler et al., *Phys. Rev. Lett.*, **47**(1981), 864.
- [8] P. Rüden and G. H. Döhler, *Phys. Rev. B*, **27**(1983), 3538.
- [9] K. Ploog et al., *Appl. Phys. Lett.*, **38**(1981), 870.
- [10] H. Küntzel et al., *Appl. Phys. A*, **27**(1982), 1.
- [11] H. Küntzel et al., *Appl. Phys. Lett.*, **41**(1982), 852.

光 子 是 不 稳 定 的 吗?!

美国哈佛大学的三位著名物理学家 Howard Georgi, Paul Ginsparg 和 Sheldon Glashow^[1] 在强相互作用的标准规范场理论基础上,加以推广并推论出存在着“B型”光子(脱耦光子),而且它和通常与物质耦合的光子(A型光子)之间可能发生振荡。现在公认的普通光子质量上限为 $\sim 6 \times 10^{-16}$ 电子伏,与电子的质量五十万电子伏相比,是微不足道的,但重要的是光子的质量不为零。由于所假设的光子振荡产生的任一可观测效应,将最清楚地显示出光子曾经历过漫长的旅途

而未受干扰,宇宙中经历最长距离旅行的光子是大爆炸留下来的宇宙背景辐射中的光子。有趣的是,按照上述三位物理学家的推导,若光子的质量为 5×10^{-18} 电子伏,则光子振荡说对观测到的宇宙背景辐射的解释,要比稳定光子说贴切得多!

但这样一来,建造包括这一额外光子的完全统一形式场论,看来就不大可能了。

(许 犇)

- [1] Howard Georgi et al., *Nature*, **306**(1983), 765.

光 速 在 减 慢 吗?

量子电动力学是物理学理论中最精确的。这一理论,描述带电粒子的亚原子行为和它们与电磁辐射的相互作用。理论推导结果与实验数据吻合得非常好,相差不到千万分之一。但 R. Tarrach^[1]指出,至今只验证了理论的零温度形式。因此,他考虑了光子(电磁能或光波的波包)在温度相对低的我们现在的宇宙中

传播的效应。Tarrach 指出,使光子速度减慢占主导地位的效应,是传播光子与热辐射背景的光子相互作用。遗憾的是,这一效应非常非常小,很难用实验检验。在室温下($\sim 300\text{K}$),该效应只改变光速的 2.5×10^{-34} !

(许 犇)

- [1] R. Tarrach, *Physics Letters*, **133B**(1983), 259.