

量子阱的光学性质

徐仲英 葛惟锟

(中国科学院半导体研究所)

随着分子束外延(MBE)和金属有机化合物气相沉积(MOCVD)超薄层外延生长技术的发展,半导体超晶格和量子阱结构的研究工作已引起人们极大的兴趣^[1-3]。这个研究领域之所以倍受重视,除了因为有明显的技术应用前景之外,还因为在物理上它提供了一个极好的、能在实验上观察量子尺寸效应的理想模型。

所谓半导体超晶格、量子阱结构,通常是指两种不同(组分不同或掺杂不同)的半导体单晶薄膜周期性地交替叠合在一起形成的多层结构。习惯上称各周期之间相互耦合的结构为超晶格,而各周期之间相互独立(波函数不相互贯穿)的结构称为量子阱。为了观察量子尺寸效应,薄膜厚度应小于电子的德布罗意波长。此外,薄层厚度的均匀性,晶格的完整性以及足够长的载流子寿命对量子尺寸效应的实验观察也具有决定性的意义。

本文将重点介绍 GaAs-GaAlAs 量子阱异质结构光学性质研究上的一些重要进展,这些研究工作已成为研制各种量子阱光电器件如量子阱激光器、量子阱光电探测器和光学双稳态器件的理论基础。

一、理论基础

1. 一维方势阱中的薛定谔方程

载流子(电子、空穴)在垂直薄膜方向的运动,可以用一维方势阱中的粒子运动来处理,这是量子力学中最基本的问题之一。

假设势阱无限深($V = \infty$),此时薛定谔方程及其解为

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)d^2\phi/dZ^2 = E\phi, \quad (1)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L_z}\right)^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2)$$

$$\phi_n = A \sin\left(\frac{n\pi Z}{L_z}\right). \quad (3)$$

这就是说,粒子在一维方势阱中的运动是量子化的,阱中存在一系列的分立束缚态,粒子运动的波函数为正弦函数,边界条件要求在阱的界面 $\phi_n = 0$ 。

但是在一般情况下,势阱不可能无限深,只可能为有限深势阱($V = V_0$),例如 GaAs-GaAlAs 异质结的情况(如图 1 所示)。定性地说,这种有限深势阱的情况仅仅意味着运动粒子将穿透势垒层,上述边界条件不再成立。此时,问题可分为阱内、阱外两部分来讨论。相应的薛定谔方程分别有下列形式:

$$\text{阱内: } \begin{cases} V = 0, & |Z| < \frac{L_z}{2}, \\ d^2\phi/dZ^2 + K_2^2\phi = 0, & (4) \\ K_2 = \sqrt{2m_1^*E/\hbar}. & (5) \end{cases}$$

$$\text{阱外: } \begin{cases} V = V_0, & |Z| > \frac{L_z}{2}, \\ d^2\phi/dZ^2 - K_1^2\phi = 0, & (6) \\ K_1 = \sqrt{2m_2^*(V_0 - E)/\hbar}, & (7) \end{cases}$$

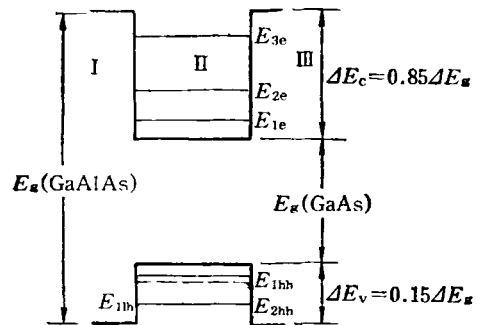


图1 GaAs-GaAlAs 量子阱有限深方势阱示意图

其中 m_1^* 为 GaAs 势阱中粒子的有效质量, m_2^* 为势垒层 GaAlAs 中粒子的有效质量, L_z 为 GaAs 势阱宽度.

这里我们只考虑 $0 < E < V_0$ 内的实数解及波函数的有限性, 于是得到上述方程组的一组解:

$$\phi_I = Ae^{K_1 z}, \quad (8)$$

$$\phi_{II} = B \sin(K_2 z + \delta), \quad (9)$$

$$\phi_{III} = Ce^{-K_1 z}. \quad (10)$$

由这些解可以看出, 当粒子能量小于 V_0 时, 仍可以在阱外找到粒子, 只是几率按指数规律随 $|z|$ 的增加而减小.

对(8),(9)和(10)各式进行微分, 并从波函数及其微商的连续性出发, 我们得到

$$K_2 \operatorname{ctg} \left(-\frac{L_z}{2} K_2 + \delta \right) = K_1, \quad (11)$$

$$K_2 \operatorname{ctg} \left(\frac{L_z}{2} K_2 + \delta \right) = -K_1. \quad (12)$$

由(11),(12)式, 并令

$$\alpha = \left(\frac{L_z}{2} \right) K_2, \quad \beta = \left(\frac{L_z}{2} \right) K_1,$$

最后可得到上述薛定谔方程的两组解:

偶宇称解:

$$\alpha \operatorname{tg} \alpha = \beta \quad n = 1, 3, 5, \dots; \quad (13)$$

奇宇称解:

$$\alpha \operatorname{ctg} \alpha = -\beta \quad n = 2, 4, 6, \dots, \quad (14)$$

其中 α 和 β 由(5),(7)两式得到:

$$\alpha = (L_z^2 m_1^* E / 2\hbar^2)^{1/2}, \quad (15)$$

$$\beta = \left[\frac{L_z^2 m_2^* (V_0 - E)}{2\hbar^2} \right]^{1/2}. \quad (16)$$

由(13),(14),(15)和(16)式, 可以解得一维方势阱中的各个束缚态, 常称为子能带. 显然, 相应于导带和价带, 有电子的子能带和空穴的子能带之分, 图1中分别用 E_{1c}, E_{2c}, E_{3c} 和 $E_{1bh}, E_{2bh}(E_{1lh})$ 表示电子和重空穴(轻空穴)子能级的位置.

2. 实际三维势阱中的电子态

在实际结构中, 除载流子在垂直薄层方向 (Z 方向) 的运动外, 还存在 X 和 Y 方向的运动, 这就是实际三维空间的情况, 于是能量的本征

值可写为

$$E = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (K_x^2 + K_y^2). \quad (17)$$

对无限方势阱,

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L_z} \right)^2. \quad (18)$$

在 K 空间, K_x, K_y 方向上的能级是连续的, 对每个 E_n 值, 将在 K_{xy} 平面内形成一个二维能量面. 在这样一个二维系统中, 态密度与粒子能量无关, 这是二维系统的一个很重要的特点, 其结果就是在量子阱结构中形成台阶状的状态密度分布, 如图2所示, 图中 1, 2, 3, 4 表示在 Z 方向的分裂能级 (n). 这个二维系统中的状态数可以用(19)式表示, 并由此可以近似地计算二维系统中的能量填充效应及相应的费米能级⁽⁴⁾.

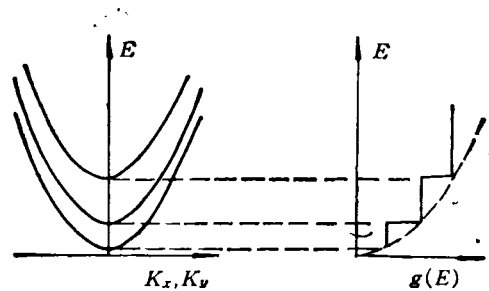
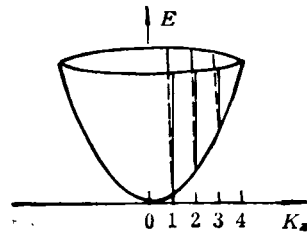


图2 量子阱结构中的二维台阶状态密度分布

$$N = 2g \sum_{E_i} \int_{E_i}^{\infty} f(E - E_F) dE, \quad (19)$$

其中 E_i 为量子化能级, E_F 为费米分布函数, $g = m^*/2\pi\hbar^2$ 为二维态密度.

3. 量子阱中子能级位置的实际计算

前面已经从薛定谔方程出发, 讨论了一维方势阱中各个束缚态的位置. 利用上述结果,

可以计算实际量子阱结构中各个子能级的位置,但在具体计算中,应考虑下列诸因素:

(1) 实际势阱深度是有限的.

(2) GaAs 能带结构的非抛物线性质,即电子的实际有效质量应是电子能量的函数. 用 $K \cdot P$ 微扰法修正电子有效质量,得到^[5]

$$m^*(E) = (0.0665 + 0.0436E + 0.236E^2 - 0.147E^3)m_0^*, \quad (20)$$

式中 E 的单位是 eV. 上述修正最明显的效果是大大降低了计算得到的高序数子能级位置,而对 $n = 1$ 子能带的影响较小.

(3) 能带的不连续量. 实际势阱深度取决于异质结能带的不连续量. 对 GaAs-GaAlAs 量子阱异质结结构来说,

$$\Delta E_g = E_g(\text{GaAlAs}) - E_g(\text{GaAs}).$$

Dingle 等^[4]用光吸收实验确定

$$\begin{cases} \Delta E_c = (0.85 \pm 0.03)\Delta E_g, \\ \Delta E_v = (0.15 \pm 0.03)\Delta E_g. \end{cases} \quad (21)$$

近年来,文献中出现了一些新的实验数据,例如 $\Delta E_c = 0.67\Delta E_g$ (Okumura 等人)和 $\Delta E_c = 0.75\Delta E_g$ (Dawson 等人). 显然,采用不同的结果将直接影响理论计算的精确性.

(4) 实际势阱形状. 在前面的计算中,假设了势阱是一个理想方势阱,即异质结界面对,而实际势阱形状与外延生长过程有密切关系. 根据文献报道,MOVPE 生长的 GaAs-GaAlAs 界面的过渡层厚度可以达到 5—20 Å^[6]. 实际势阱形状与方势阱之间的差异将直接影响到子能级的位置.

尽管上述计算比较近似,但是在实际工作中用它来确定量子阱阱宽 L_z ,可以得到较满意的结果. 图 3 给出了 $x = 0.25, 0.35$ 和 0.45 的 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱子能带间允许跃迁 ($\Delta n = 0$) 的光子能量与阱宽 L_z 之间的关系. 表 1 比较了上述计算结果和文献报道的一些实验数据,两者吻合得很好^[7].

应当指出,光荧光实验得到的峰值位置是本征激子发光能量位置,与理论计算中的子能级位置相差一个激子束缚能. 激子束缚能是 L_z 的函数,也是势阱高度(与 x 值有关)的函数.

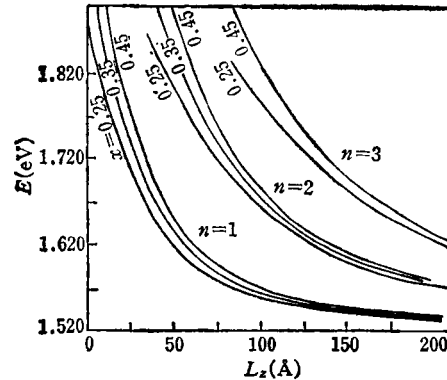


图 3 GaAs-GaAlAs 量子阱中子能带间允许跃迁的光子能量与阱宽 L_z 之间的关系 (4.2K)

表 1 势阱宽度的计算值和文献报道的实验数据之间的比较

$n = 1$ 的光荧光峰值位置 (eV)	x	文献报道 L_z (Å)	理论计算 L_z (Å)
1.529	0.22	164	169
1.531	0.3	160	162
1.584	0.28	66	67
1.618	0.28	49	49
1.614	0.22	46	45

二、实验研究

在量子阱光学性质的研究方面,国内、外已经做了很多实验工作. 光吸收谱、发射谱、激发谱、喇曼谱以及微微秒光谱方面的许多研究工作不仅有力地揭示了量子阱结构中台阶状的态密度分布和子能带结构,同时也已成为研制各种量子阱结构光电器件的重要理论基础.

1. 本征发光(吸收)研究

(1) 光吸收实验

R. Dingle 等人^[4]首先完成了 GaAs-GaAlAs 量子阱结构中的光吸收实验. 样品由 MBE 生长,阱宽 L_z 为 40—5000 Å,总吸收厚度约为 4000 Å. 图 4 是典型的吸收光谱曲线, L_z 分别为 140 Å, 210 Å 和 4000 Å. 当 $L_z \geq 500$ Å 时,量子阱材料的吸收光谱和实际体材料的吸收光谱已经没有区别,已观察不到量子尺寸效应,光谱中仅观察到位于本征带边以下大约 4 meV 的激子吸收峰. 当 L_z 减小时,吸收峰移向高能边,移动量近似地正比于 L_z^{-2} . 此外整个光谱呈台

阶状,在每个台阶处有一个明显的激子吸收峰。上述实验结果与图5定性分析得到的结果一致。

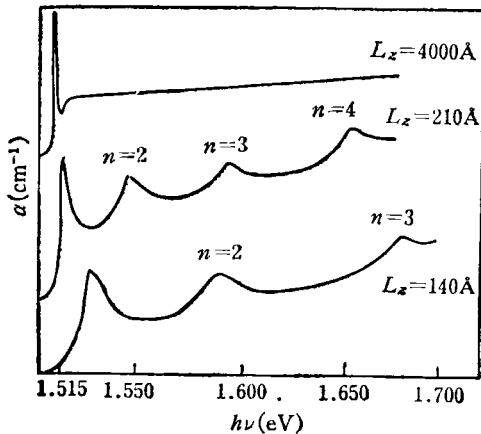


图4 不同阱宽的 GaAs 多量子阱的吸收光谱(2K)

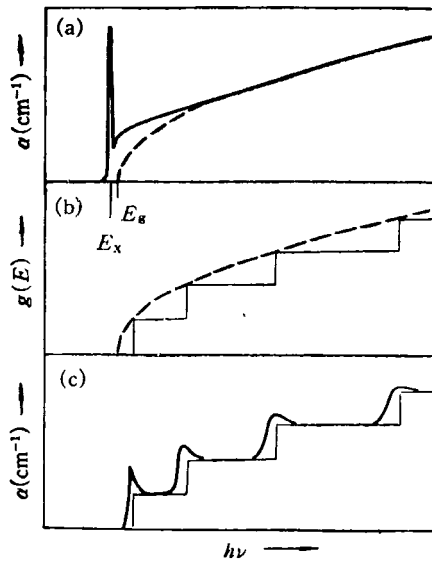


图5 (a) GaAs 体材料的吸收光谱;(b)体材料和量子阱结构的态密度分布比较;(c)量子阱的吸收光谱示意图

量子阱结构中存在较强的激子吸收线已为实验所证实^[8],激子吸收峰不仅在低温下很锐,而且在室温下也十分明显。其原因一方面是由于二维系统对载流子的限制作用增加了激子的束缚能;另一方面则是因为声子散射造成的谱线增宽很小。量子阱中的激子吸收具有非线性饱和特性,其物理机理可能是:激子-激子碰撞、激子态的耗尽和自由载流子对激子的屏蔽。

新近研究还表明,与三维体材料相比,二维系统具有较短的激子屏蔽长度。量子阱结构的这种非线性光学效应正是光学双稳态的基础。1982年 Gibbs 等人^[9]首先报道了在量子阱标准具中实现激子型的光学双稳态。其工作原理是:当入射光子能量稍低于量子阱中激子的吸收能量时,少量的吸收所产生的载流子可以改变激子共振态的吸收率和偏振度,从而使材料的折射率可以随入射光强度进行调谐。

(2) 光荧光激发谱

用光荧光激发谱研究量子阱结构,可以得到相当丰富的光谱结构。与光吸收实验相比,它不需要复杂的样品制备工艺,但是需要一台有一定工作波段的近红外可调谐激光器作激发光源。R. C. Miller 等人^[10]曾详细地研究了 GaAs-GaAlAs 量子阱结构的光荧光激发谱,他们不仅观察到与量子阱台阶状态密度相对应的允许跃迁($\Delta n = 0$),同时还观察到 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁,其中包括禁戒跃迁,如图6所示(图中纵坐标代表荧光强度)。实验样品为 GaAs-GaAlAs 多量子阱结构, $L_z = 260 \text{ \AA}$, $L_b = 260 \text{ \AA}$,激发功率密度为 60 W/cm^2 ,激发用的光学参量振荡器的工作波段在 $7500-8100 \text{ \AA}$ 。

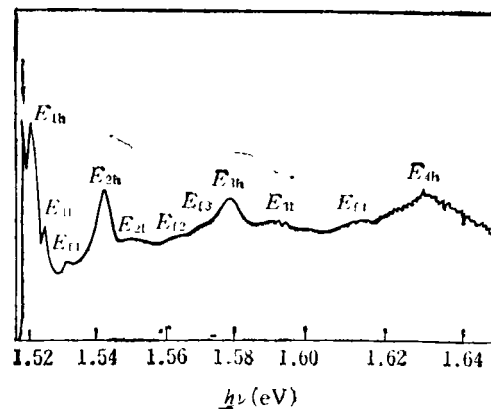


图6 GaAs-GaAlAs 多量子阱光荧光激发光谱 E_{nh} 和 E_{nl} 为电子到重(轻)空穴的激子跃迁; E_{ln} 为禁戒跃迁;探测能量用箭头表示

(3) 光荧光光谱

光荧光测量技术简便易行,常常用于材料的光学性质研究。但是,在常规的低温光荧光

中,一般只能看到量子阱结构中 $n = 1$ 的发光,只有在较高的温度下才能观察到 $n = 2$ 和 $n = 3$ 的发光^[10]。这种发光是由于光生载流子热化作用产生的较高束缚态上载流子的填充效应造成的。尽管如此,因为在大多数场合下,人们并不关心较高束缚态的发光,因此低温光荧光技术仍然广泛用于量子阱结构的研究,尤其是它作为一个重要的光学手段,可用于控制外延生长质量、监测生长厚度和研究不同结构的发光效率。

值得指出的是,当样品受到高强度超短脉冲激发时,由于大量载流子的注入产生载流子的填充效应,以及高激发态电子的快速弛豫、热化过程,造成较高的电子热分布,电子温度可远高于晶格温度,因而大大增加了 $n = 2$ 和 $n = 3$ 的子能带跃迁的可能性,实验上可同时观察到 $n = 1, 2, 3$ 的子能带之间的跃迁。图 7 为微微秒脉冲光激发下 MOCVD 生长的 GaAs 多量子阱结构的光荧光光谱,图中横坐标上注明了计算得到的允许跃迁位置,用 1, 2, 3 表示 E_{nh} 的位置, 1' 表示 E_{11} 的位置。

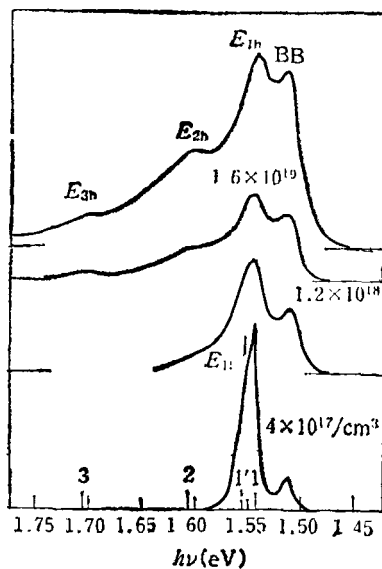


图 7 不同激发强度下微微秒脉冲激发下的 GaAs 多量子阱光荧光光谱

2. 杂质发光研究

浅杂质的行为对体材料性质起极重要的作

物理

用。在体材料中,即使纯度很高,观察到的发光跃迁也常常与杂质相关,光谱上通常表现为中性施主或中性受主上的束缚激子发光,如 (D°, X) 、 (A°, X) 等,而自由激子发光很弱。与体材料相反,在量子阱材料中,人们常常只观察到 $n = 1$ 的电子和相应空穴之间的本征激子发光,而杂质发光往往很弱。黄昆教授最近对量子阱中的自由激子吸收进行了量子力学推导,指出量子阱中的自由激子具有二维性,没有厚度的概念。当势阱变窄时,自由激子密度增大,而杂质中心数则随层厚减薄按比例地减小,从而在理论上解释了上述实验现象。

R. C. Miller 等人^[11]实验上详细地研究了 GaAs-GaAlAs 量子阱中的杂质发光,观察到导带束缚态电子到中性受主之间的发光跃迁,并认为这些中性受主在几何上位于阱中心或位于异质界面附近。所用样品为多量子阱结构,不掺杂。由发光光谱可以确定出杂质的束缚能 $E(A^{\circ})$, 它们是量子阱宽度和杂质位置两者的函数,实验结果在图 8 中用空心圆点表示,当阱宽 L_z 和杂质的玻尔半径可相比拟时(例如图中 $L_z = 50 \text{ \AA}$ 的样品),均匀分布的杂质可以在阱中心和界面处形成杂质态密度的极大值,因此实验上同时观察到了与阱中心杂质相关的发光和界面附近杂质相关的发光。但是,当残留杂质浓度较高时,发光光谱中可表现出较强的杂质峰,并有可能在阱宽较大的样品中也观察到与界面附近杂质相关的发光峰,这一点已为实验所证实^[12],其结果在图 8 中用实心圆点表示。R. C. Miller 等^[13]在研究单量子阱中杂质的发光行为时曾指出,与界面有关的杂质发光是由于杂质在界面附近的积累和界面完整性的破坏造成的。此外, H. Jung 等人^[14]在实验上观察到束缚在缺陷中心的类受主束缚激子发光 (d°, X) 。压力光谱表明^[15],这种束缚激子态在量子阱中的压力系数要比体材料的来得大,这意味着量子阱中的深中心发生了浅化。

理论上,对量子阱中的浅杂质电子态的研

1) 赵学恕,李国华等,半导体学报,待发表。

究也日益受到重视。Bastard^[45] 首先用变分法研究了 GaAs-GaAlAs 量子阱中的类氢杂质态, 在他的计算中, 势垒高度取作无限大, 完全忽略了波函数对势垒的穿越。计算表明, 量子阱中类氢杂质基态的束缚能 $E(A^\circ)$ 是量子阱阱宽 L_z 和杂质位置两者的函数。图 8 中的粗实线给出了碳受主的 $E(A^\circ)$ 和 L_z 的关系。上面一条曲线表示杂质位于阱中心, 而下面一条曲线表示杂质位于界面附近。Bastard 的计算还表明, 当 L_z 和杂质的玻尔半径可相比拟时, 界面处单位能量内的杂质态密度相对增大, 即使在杂质均匀分布时也可以在阱中心和界面处找到杂质态密度的极大值。此外, Mailhiot 等和 Greene 等人分别利用真实的有限势垒模型计算了类氢杂质的束缚态, 前者还考虑到两种材料不同的电子有效质量和介电常数的影响。

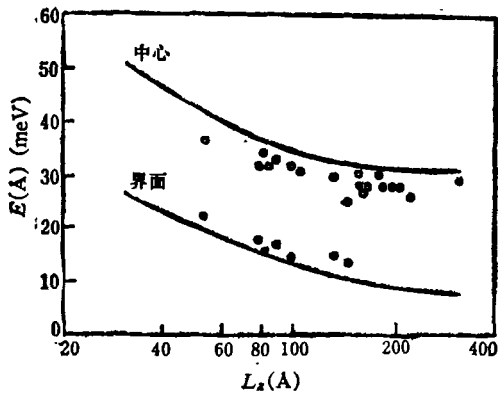


图 8 GaAs-GaAlAs 多量子阱中 C 受主束缚能和阱宽 L_z 之间的关系

3. 受激发射特性

把量子阱材料做成光学谐振腔, 即可能实现量子阱结构的受激发射。由于量子阱结构具有限制载流子的二维台阶状态密度的优点, 量子阱激光器预期可以具有低的激光阈值和良好的温度特性。此外, 改变量子阱的阱宽, 可以方便地实现不同波长的激光输出, 即具有良好的可调谐特性, 较容易实现短波长可见光受激发射。

图 9(a) 用来说明量子阱复合发光的优点, 复合发光原则上可以发生在电子的某一个束缚

子能级(带)到空穴的某一个束缚子能级(带)之间。符合跃迁选择定则 $\Delta n = 0$, 因此具有跃迁几率大和带宽窄等优点。而在体材料中, 参与复合发光的载流子态密度分布沿抛物线变化, 因此不可能具有固定的波长和窄的带宽。

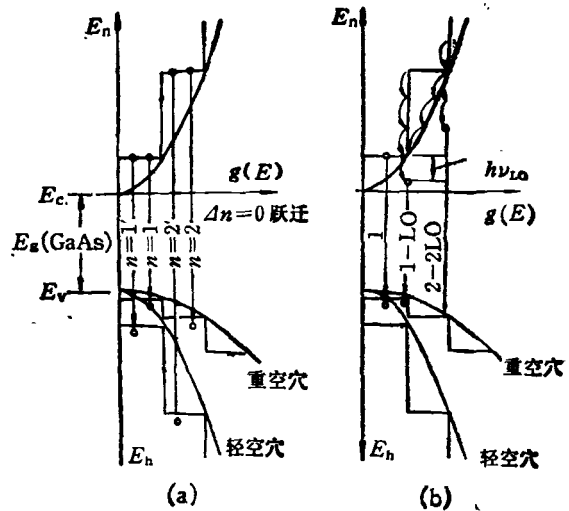


图 9 (a) GaAs-GaAlAs 量子阱能带之间的复合发光; (b) 量子阱结构和体材料中的电子散射机构和声子参与激光跃迁示意图

(图中 $E_{1h} - \hbar\omega_{LO}$ 表示有一个声子参与的 $n=1$ 跃迁能量, $E_{2h} - 2\hbar\omega_{LO}$ 表示有两个声子参与的 $n=2$ 跃迁能量)

量子阱受激发射的第一个实验工作是贝尔实验室于 1975 年报道的, 他们用的样品为 80 个周期的多量子阱结构, 用 1.67eV 的脉冲激光束光泵, 实验观察到对应 $n=1$ 的激光跃迁。之后, 这个领域中的研究工作十分活跃, 主要研究内容有两个方面: 一是受激发射的物理机理研究; 二是从量子阱对载流子的限制作用出发, 研究不同阱结构对载流子的限制和收集作用, 旨在提高发光效率, 降低激光阈值, 以便实用化。

在受激发射物理机理研究中, 具有代表性的是 N. Holonyak 小组的工作^[46], 他们于 1979 年观察到声子参与的受激发射跃迁, 并提出了理论模型。根据这个模型, 在量子阱结构中, 由于具有台阶状的常数态密度结构, 载流子在热化弛豫过程中不象体材料那样态密度沿抛物线

不断减小,因此有利于继续放出声子,从而提供了声子参与激光跃迁的可能性,如图 9(b)所示。实验上 Holonyak 等人观察到的激光跃迁覆盖了很宽的光谱范围,从 GaAs 的 E_g 以下几十个 meV 到 E_g 以上几百个 meV,其中包括 $n = 5$ 束缚态之间的发光和有 5 个 LO 声子参与的受激跃迁。但是, Holonyak 等人的实验工作没有得到普遍的承认和证实,而且在电注入的量子阱激光器中从未观察到声子参与激光跃迁的过程。

在量子阱激光器实用化研究中,重点是提高量子阱结构中的载流子收集效率,提高发光效率和降低阈值^[17]。早期的量子阱结构中,限制层和势垒层具有相同的势垒高度,即相同的 x 值 ($x \geq 0.3$),如图 10(a)所示。这种结构对光的限制作用小,但阈值仍可达到相应于双异质结结构的最低阈值水平,大约 $800\text{A}/\text{cm}^2$ 。之后,为了改善光限制和提高阱层对载流子的收集作用,1981 年在贝尔实验室曾焕添等人提出了一种新的量子阱结构,即限制层和势垒层采用不同的高度,如图 10(b)所示。在这种结构中,大阱起着载流子储槽和光波导作用,它的阈值电流密度和势垒层的 x 值有关。研究表明, $x = 0.45, y = 0.2$ 的分别限制结构(SCH)具有最低的阈值。采用这种结构,曾研制成阈值电流密度为 $250\text{A}/\text{cm}^2$ 的量子阱激光器。Camras 等人利用这种结构在 MOCVD 生长的单量子阱结构上实现了低阈值光泵室温连续相干辐射,等效电流密度为 $70\text{A}/\text{cm}^2$ ^[18]。另一种结构称为渐变指数分别限制结构 (GRIN-SCH) 也是由曾焕添等人首先提出的,如图 10(c)所示^[19]。这种结构旨在用漏斗形的限制层结构增

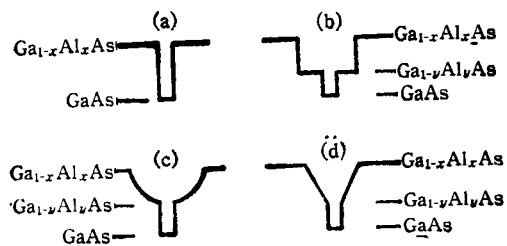


图 10 几种典型的量子阱势阱结构

强载流子的收集作用,并有效地引导光波导。用 GRIN-SCH 结构已成功地研制出阈值电流密度低至 $160\text{A}/\text{cm}^2$ 的量子阱激光器。此外, Welch 等人^[19]用梯度结构[图 10(d)]制成外量子效率为 36%、微量子效率为 63%、单面输出功率达 65mW 的平面条形激光器 ($5 \times 96\mu\text{m}$)。为克服 GaAlAs 层上生长 GaAs 质量不高的缺点,最近还有人提出用短周期超晶格代替 GaAlAs 限制层,以进一步提高发生效率,降低激光阈值。

量子阱激光器研制方面的其他进展还包括大功率、可见光激光器的研制。阱宽 13\AA 、室温连续工作、受激波长为 7040\AA 的多量子阱激光器,以及功率高达 100mW 的波长为 7300\AA 的可见光量子阱激光器都已见报道。另外,受激波长为 $1.2\text{--}1.6\mu\text{m}$ ($80\text{K--}80^\circ\text{C}$) 的 GaSb- $\text{Al}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{Sb}$ 多量子阱激光器和 $1.5\text{--}1.6\mu\text{m}$ 的 $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{Al}_{0.49}\text{In}_{0.52}\text{As}$ 多量子阱激光器也都已研制成功,从而有可能为光纤通信提供新的长波光源。

总之,短短几年,在超晶格量子阱光学性质研究方面已取得很丰硕的成果,这些研究成果直接推动了各种量子阱光电器件的研制工作和超晶格量子阱的物理研究。此外,关于量子阱结构中的载流子输运、弛豫、复合发光动力学过程等,国外也开展了大量研究工作,我们准备另文评述这方面的进展和成果。

参 考 文 献

- [1] R. Dingle, in Proc. of 13th Int. Conf. on Phys. of Semiconductors, North-Holland, Amsterdam, (1976), 965.
- [2] M. Jaros, K. B. Wong, *J. Phys. C: Solid St. Phys.*, **17**(1984), 765.
- [3] 葛惟银、徐仲英,自然杂志, **8**(1985), 409.
- [4] Z. Y. Xu, V. G. Kreismanis and C. L. Tang, *Appl. Phys. Lett.*, **43**(1983), 415.
- [5] R. M. Kolbas, Ph. D. Thesis, University of Illinois, (1979), 163.
- [6] P. M. Frijlink and J. Maluenda, *Jpn. J. of Appl. Phys.*, **21**(1982), L574.
- [7] 徐仲英、许继宗、李玉璋、郑宝真、徐俊英、庄蔚华、陈宗圭,半导体学报, **7-3**(1986), 319.
- [8] D. A. B. Miller et al., *Appl. Phys. Lett.*, **41**(1982), 679.

[9] H. M. Gibbs et al., *Appl. Phys. Lett.*, **41**(1982), 221.
 [10] R. C. Miller et al., *Phys. Rev. B*, **22**(1980), 863
 [11] R. C. Miller et al., *Phys. Rev. B*, **25**(1982), 3871.
 [12] Z. Y. Xu, Z. G. Chen, et al., *Chinese Phys. Lett.*, **2-12**(1985), 529.
 [13] R. C. Miller et al., *Appl. Phys. Lett.*, **41** (1982), 374.
 [14] H. Jung, A. Fischer, and K. Ploog, *Appl. Phys.*

A, **33**(1984), 9.
 [15] G. Bastard, *Phys. Rev. B*, **24**(1981), 4714
 [16] N. Holonyak, Jr. et al., *IEEE Quantum Electr.*, **QE-16**(1980), 170.
 [17] W. T. Tsang, *ibid.*, **QE-20**(1984), 1119.
 [18] M. D. Camras et al., *Appl. Phys. Lett.*, **42**(1983), 761.
 [19] D. F. Welch et al., *Appl. Phys. Lett.*, **46**(1985), 121.

准晶体的原子间向量函数

急冷 Al-Mn, Al-Fe, Al-Cr 和 Ni-Ti-V 合金中准晶体的发现^[1-3]向我们提出了发展准晶体结构分析技术的研究课题。目前准晶体颗粒只有微米量级,高分辨电子显微术应是一种有前景的准晶体结构分析手段。可是,高分辨电子显微象的分辨率有限,难以从象上分辨开准晶体中的单个原子。而从分辨率上说,电子衍射图所携带的结构信息远比高分辨电子显微象丰富。在高分辨电子显微象图象处理的工作中,已证明把电子衍射与电子显微象的信息结合起来,可以提高象的分辨率^[4]。如把准晶体的电子衍射图与高分辨电子显微象结合起来,无疑将有助于准晶体结构的测定。

对于运动学电子衍射的情形,衍射波是电势分布函数 $\varphi(\mathbf{r})$ 的傅里叶变换,

$$Q(\mathbf{u}) = \int \varphi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (1)$$

电子衍射波的强度

$$I_d(\mathbf{u}) = Q(\mathbf{u})Q^*(\mathbf{u}). \quad (2)$$

(2)式的傅里叶反变换为

$$P(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) * \varphi(-\mathbf{r}), \quad (3)$$

(3)式右端是电势分布函数的自卷积。于是,函数 $P(\mathbf{r})$ 是原子间向量函数,它相当于 X 射线衍射晶体学中的 Patterson 函数,也相当于非晶体衍射分析中的径向分布函数。求得准晶体原子间向量函数的最简便方法是做电子衍射图的光学傅里叶变换。

图 1 是急冷 Al-Mn 合金中准晶体沿五次对称轴拍摄的电子衍射花样。图 2 是图 1 的光学傅里叶变换花样。准晶体原子间向量函数有明锐的峰这一事实指出,对它的分析应与分析晶体的 Patterson 图相似。

由于电子衍射的动力学效应很强,按上述方法得到的原子间向量函数从定量的角度上与实际情形有一定出入,但是定性上是可用的。目前,配合高分辨电子显微象来分析不同方向投影的准晶体原子间向量函数的工作正在进行中^[5]。

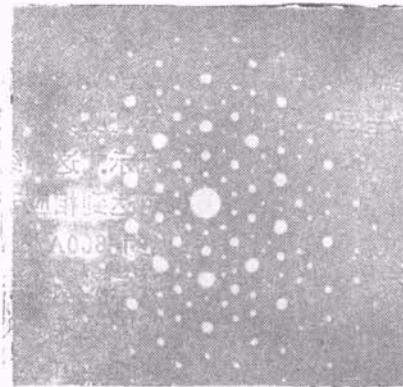


图 1

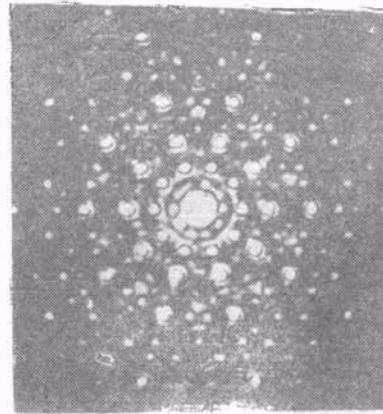


图 2

[1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984), 1951.
 [2] R. D. Field, and H. L. Fraser, *Mater. Sci. Eng.*, **68** (1984), L17.
 [3] 郭可信, *物理*, **14**, (1985), 449.
 [4] Fan Hai-fu, Zhong Zhi-yang, Zheng Chao-de and Li Fang-hua, *Acta Cryst.*, **A41** (1985), 163
 [5] Li Fang-hua, Liu Wei and Liu Zhi-yi, *Chinese Phys. Lett.*, (in Press).

(李方华、刘 维)