

超晶格电子结构的赝势计算*

夏 建 白

(中国科学院半导体研究所)

A. Baldereschi

(Institute of Applied Physics, EPF-Lausanne, Switzerland)

and

Department of Theoretical Physics and GNSM-CISM, University of Trieste, Italy)

1987年2月3日收到

本文提出了一个用赝势计算长周期超晶格的方法。检验了超晶格子能级对 g , G 和 ϕ 数目的收敛性, 利用 11 个 g 和 10 个 ϕ 就能得到收敛性很好的结果。还考虑了自旋轨道耦合效应以求得空穴子能带。结果与其它理论方法作了比较。得到了超晶格量子态的真实波函数, 并严格地计算了光学跃迁矩阵元。

一、引言

半导体超晶格和量子阱在最近几年内已得到广泛的研究。目前超晶格电子结构的理论计算主要有两大类: 一类是基于有效质量理论的包络函数方法^[1-3], 一类是 Schulman 和 Chang 提出的经验紧束缚的复能带方法^[4]。这两种方法都得到了一些有意义的结果, 但是它们还有一些问题和困难。例如: 有效质量方法一般只适用于第一类超晶格, 不适用于第二类超晶格。它还不适用于组成超晶格的两种材料的带边不在布里渊区同一点的情形以及没有考虑到能带的非抛物性等等。紧束缚方法具有许多的经验可调参数, 一般它不能得到正确的导带结构。

赝势方法已经证明是研究半导体电子结构的一种有效的方法^[5]。但是将赝势方法应用于超晶格计算有一定的困难。因为元胞太大, 包含了太多的平面波。所以目前只有一些用赝势计算短周期超晶格的工作。例如 $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ ^[6] 和 $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m$ ($2 < n + m < 8$)^[7] 的经验赝势计算以及 $(\text{Ge})_n(\text{GaAs})_m$, $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m$ ^[8] 和 $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m$ ($n = 1-4$)^[9] 的自洽赝势计算等等。[以上 (GaAs) 和 (AlAs) 等的数字脚标代表超晶格每一周期中所包含的两种材料的原子层数, 以下同]。

本文将提出一种计算长周期超晶格电子结构的赝势方法。我们用 $(\text{GaAs})_{48}(\text{Al}_{0.2} \text{Ga}_{0.79} \text{As})_{52}$ 作为模型说明这种方法, 并且与其它方法作比较。本文安排如下: 第二节是方法, 第三节是收敛性的检验, 第四节是超晶格的电子子能带, 第五节是超晶格的空穴子

* 本文是作者在 1986 年 2 月至 8 月, 在意大利, Trieste, 国际理论物理中心工作期间完成的。

能带,第六节是光学跃迁矩阵元,第七节是结论。

二、方 法

超晶格的薛定谔方程是,

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

(本文采用原子单位). 将晶体势 $V(\mathbf{r})$ 用平行于界面的平面波展开,

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \sum_i e^{-i\mathbf{G}_i\cdot\mathbf{r}} V_i(\mathbf{G}) \\ &= \sum_{\mathbf{G}_H} e^{i(\mathbf{k}_H + \mathbf{G}_H)\cdot\mathbf{r}_H} \sum_i e^{-i(\mathbf{G}_H + \mathbf{g}_i)\cdot\mathbf{r}_H} w_i(\mathbf{G}_H, z) \end{aligned} \quad (2)$$

其中,

$$\begin{aligned} w_i(\mathbf{G}_H, z) &= \sum_{\mathbf{G}_s} V_i(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{G}_s - \mathbf{G}_H)\cdot\mathbf{r}_s} \\ \mathbf{G}^2 &= \mathbf{G}_H^2 + \mathbf{G}_s^2 \end{aligned} \quad (3)$$

$\mathbf{G}, \mathbf{G}_H, \mathbf{G}_s$ 是单晶的倒格矢基矢及其分量. 类似地展开波函数,

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{s}} \sum_{\mathbf{G}_H} e^{i(\mathbf{k}_H + \mathbf{G}_H)\cdot\mathbf{r}_H} f_{\mathbf{G}_H}(z) \quad (4)$$

将(2)和(4)代入(1), 得到,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (\mathbf{k}_H + \mathbf{G}_H)^2 f_{\mathbf{G}_H}(z) &- \frac{1}{2} \frac{d^2 f_{\mathbf{G}_H}(z)}{dz^2} + \sum_{\mathbf{G}'_H} \left[\sum_i e^{-i(\mathbf{G}_H - \mathbf{G}'_H) \cdot \mathbf{r}_H} w_i(\mathbf{G}_H - \mathbf{G}'_H, z) \right] \\ f_{\mathbf{G}'_H}(z) &- Ef_{\mathbf{G}_H}(z) \end{aligned} \quad (5)$$

再将方程(4)中的函数 $f_{\mathbf{G}_H}(z)$ 用垂直于界面的Z方向平面波展开,

$$f_{\mathbf{G}_H}(z) = \sum_{\mathbf{G}_s, g} C_{\mathbf{G}_H, \mathbf{G}_s, g} e^{i(k_s + G_s + g)z} \quad (6)$$

其中,

$$g = \frac{2\pi}{L} \cdot m \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (7)$$

L 是超晶格的周期. 将(6)代入(5), 得到,

$$\begin{aligned} &\left[\frac{1}{2} (\mathbf{k}_H + \mathbf{G}_H)^2 + \frac{1}{2} (k_s + G_s + g)^2 \right] C_{\mathbf{G}_H, \mathbf{G}_s, g} \\ &+ \sum_{\mathbf{G}'_H, \mathbf{G}'_s, g'} \left[\sum_i e^{-i(\mathbf{G}_H - \mathbf{G}'_H) \cdot \mathbf{r}_H} w_i(\mathbf{G}_H - \mathbf{G}'_H, G_s + g - G'_s - g') \right] \\ &\cdot C_{\mathbf{G}'_H, \mathbf{G}'_s, g'} = EC_{\mathbf{G}_H, \mathbf{G}_s, g} \end{aligned} \quad (8)$$

其中,

$$\omega_i(\mathbf{G}_s, G_s) = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz e^{-iG_s z} \omega_i(\mathbf{G}_s, z) \quad (9)$$

$$= \sum_{G'_s} e^{-iG'_s k_s} \cdot \begin{cases} \frac{2}{L} \frac{\sin\left(\Delta G_s \cdot \frac{l_1}{2}\right)}{\Delta G_s} [V_{\omega_i}(\mathbf{G}_s, G'_s) - V_{B_i}(\mathbf{G}_s, G'_s)], & \Delta G_s \neq 0 \\ V_{\omega_i}(\mathbf{G}_s, G'_s) \lambda + V_{B_i}(\mathbf{G}_s, G'_s)(1 - \lambda), & \Delta G_s = 0 \end{cases}$$

$\Delta G_s = G_s - G'_s$, 坐标原点取在势阱的中心, l_1 是势阱的宽度, $\lambda = l_1/L$, $V_{\omega_i}(G)$ 和 $V_{B_i}(G)$ 分别是势阱和势垒材料的赝势形状因子。

方程(8)和(9)是赝势计算超晶格的基本方程。在计算中, 代替取平面波

$$e^{i(k_s + \mathbf{G}_s) \cdot r_s + i(k_s + G_s + g)z}$$

作为基函数, 我们取虚晶的波函数,

$$\phi_{sg} = \sum_{\mathbf{G}_s G_s} C_s(\mathbf{G}_s, G_s + g) e^{i(k_s + \mathbf{G}_s) \cdot r_s + i(k_s + G_s + g)z} \quad (10)$$

作为基函数。虚晶的赝势形状因子为,

$$\bar{V}(G) = V_{\omega}(G)\lambda + V_B(G)(1 - \lambda) \quad (11)$$

哈密顿量在 ϕ_{sg} 之间的矩阵元为,

$$\langle n g | H | n' g' \rangle = \sum_{\mathbf{G}_s G_s \mathbf{G}'_s G'_s} C_s^*(\mathbf{G}_s, G_s + g) C_{s'}(\mathbf{G}'_s, G'_s + g') \cdot \langle e^{i(k_s + \mathbf{G}_s) \cdot r_s + i(k_s + G_s + g)z} | H | e^{i(k_s + \mathbf{G}'_s) \cdot r_s + i(k_s + G'_s + g')z} \rangle \quad (12)$$

其中 $\langle e^{i(k_s + \mathbf{G}_s) \cdot r_s + i(k_s + G_s + g)z} | H | e^{i(k_s + \mathbf{G}'_s) \cdot r_s + i(k_s + G'_s + g')z} \rangle$ 由(8)式给出。对于相同的 g ,

$$\begin{aligned} \langle n g | H | n' g \rangle = & \sum_{\mathbf{G}_s G_s \mathbf{G}'_s G'_s} C_s^*(\mathbf{G}_s, G_s + g) C_{s'}(\mathbf{G}'_s, G'_s + g) \\ & \cdot \left\{ \left[\frac{1}{2} (k_s + \mathbf{G}_s)^2 + \frac{1}{2} (k_s + G_s + g)^2 \right] \delta_{\mathbf{G}_s \mathbf{G}'_s} \delta_{G_s G'_s} \right. \\ & \left. + \bar{V}(\mathbf{G}_s - \mathbf{G}'_s, G_s - G'_s) \right\} - E_{ng} \delta_{nn'} \end{aligned} \quad (13)$$

取 ϕ_{sg} 作为基函数的好处是可以大大减少基函数的数目。例如对每一个 g , 如果取平面波作为基函数, 则至少需要 60 个, 而 ϕ_{sg} , 取 10 个就足够了。

因为 GaAs 或 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 价带顶的自旋轨道分裂能量约为 0.3eV, 远远大于超晶格空穴子带的能量间隔(约 0.01eV), 因此我们必须考虑自旋轨道耦合效应。

按照 Weisz^[10] 和 Chelikowsky, Cohen^[11] 的工作, 自旋轨道耦合项对赝势哈密顿量的贡献可以写为,

$$H_{\mathbf{K} \mathbf{K}'}^{\text{SO}} = \frac{(\mathbf{K} \times \mathbf{K}')}{|\mathbf{K}| \cdot |\mathbf{K}'|} \cdot \sigma_{ss'} \cdot \left\{ -i \sum_i \lambda_i e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{K}') \cdot r_i} \right\} \quad (14)$$

其中,

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_s + \mathbf{G}_s + (k_s + G_s + g)z$$

$$\mathbf{K}' = \mathbf{k}_s + \mathbf{G}'_s + (\mathbf{k}_s + \mathbf{G}'_s + g) \hat{\mathbf{z}}$$

对相同的 \mathbf{k} 和 g , $\sigma_{ss'}$ 是泡利自旋矩阵,

$$\lambda_i = \mu_i B_{nl}^i(K) B_{nl}^i(K') \quad (15)$$

μ 是可调参量, 正负离子的 μ_c 和 μ_s 之比等于自由原子的自旋轨道分裂之比。 B_{nl} 的定义为,

$$B_{nl}(K) = \beta \int_0^\infty j_{nl}(Kr) R_{nl}(r) r^2 dr \quad (16)$$

R_{nl} 是自由原子最外层 p 轨道波函数的径向部分, β 是归一化常数, 满足,

$$\lim_{K \rightarrow 0} K^{-1} B_{nl}(K) = 1 \quad (17)$$

我们利用“简并”微扰论计算超晶格的自旋轨道分裂的空穴子带。假设没有考虑自旋轨道耦合的超晶格空穴波函数为,

$$\phi_{ll'}(\mathbf{r}) = \sum_{n,g} C_{n,g}^l \phi_{n,g}(\mathbf{r}) \quad (18)$$

本征能量为 E_l 。则考虑自旋轨道耦合后的久期方程为,

$$\det |H_{ll'}^{ss'} - E_l \delta_{ll'} \delta_{ss'}| = 0 \quad (19)$$

其中,

$$\begin{aligned} H_{ll'}^{ss'} &= E_l \delta_{ll'} \delta_{ss'} + \sum_{n,g} \sum_{n',g',s'} C_{n,g}^{l*} C_{n',g'}^{l'} \langle \phi_{n,g} | H^{s0} | \phi_{n',g',s'} \rangle \\ &= E_l \delta_{ll'} \delta_{ss'} + \sum_g \left[\sum_n \sum_{n',s'} C_{n,g}^{l*} C_{n',g'}^{l'} \langle \phi_{n,g} | H^{s0} | \phi_{n',g',s'} \rangle \right] \end{aligned} \quad (20)$$

$\phi_{n,g}$ 是包括自旋分量的虚晶波函数(10), 因此,

$$\langle \phi_{n,g} | H^{s0} | \phi_{n',g',s'} \rangle = \sum_{G_g G_s} \sum_{G'_g G'_s} C_g^*(\mathbf{G}_g, \mathbf{G}_s + g) C_g(\mathbf{G}'_g, \mathbf{G}'_s + g) \cdot H_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}^{s0} \quad (21)$$

三、收敛性的检验

根据上一节的讨论, 我们将取虚晶波函数(10)作为基函数。对每一个 g , 将取 10 个包括价带和导带在内的最低的态 ($n = 1-10$)。 g 的个数由超晶格的周期决定,

$$\begin{aligned} g &= \frac{2\pi}{L} \cdot m = \frac{2\pi}{Na} \cdot m \\ m &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, + \frac{N}{2} \end{aligned} \quad (22)$$

一共有 N 个。但是对于超晶格, 我们只对势阱中的最低几个态感兴趣, 因此不必取所有 N 个 g , 而只取几个最小的 g 就足够了。从物理上讲, e^{igZ} 相当于对原来晶体波函数的一个调制函数, 也就是包络函数。对势阱中最低几个态, 包络函数在一个周期内, 只有 0, 1, 2, … 个节点。因此对应于 e^{igZ} 的长波长部分, 也就是对几个最小 g 的 e^{igZ} 的叠加。为此, 在计算前需要检验势阱中的态对于 g 的个数的收敛性。表 1 是对于超晶格 $(\text{GaAs})_{10}(\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As})$ 的检验结果。

表1 超晶格的子能级 ($k = 0$) 与 $g(Ng)$, $G(NG)$ 和 $\phi_*(N\phi)$ 数目的关系。(单位: eV)

	9	11	13	15	11	11
Ng	59	59	59	59	113	59
$N\phi$	10	10	10	10	10	15
电子能级	2.7821	2.7820	2.7820	2.7820	2.7792	2.7820
	2.7722	2.7714	2.7703	2.7702	2.7713	2.7713
	2.6859	2.6848	2.6845	2.6842	2.6864	2.6848
	2.6084	2.6080	2.6078	2.6077	2.6103	2.6079
	2.5561	2.5560	2.5560	2.5560	2.5589	2.5560
	1.1089	1.1089	1.1089	1.1089	1.1093	1.1088
空穴能级	1.1089	1.1089	1.1089	1.1089	1.1093	1.1088
	1.1003	1.1003	1.1003	1.1003	1.1005	1.1003
	1.0998	1.0999	1.1000	1.1000	1.1002	1.0999
	1.0998	1.0999	1.1000	1.1000	1.1002	1.0999
	1.0854	1.0856	1.0858	1.0858	1.0857	1.0856
	1.0854	1.0856	1.0858	1.0858	1.0857	1.0856

前四列是固定平面波的数目 ($NG = 59$) 和基函数数目 ($N\phi = 10$)，势阱中子能级能量随 g 数目的变化。由表可见，取 $Ng = 11$ 就能得到精确度在 1 meV 以内的收敛的能级。

然后检验能级对于 NG 和 $N\phi$ 的收敛性，结果列于表 1 的最后两列。可以看到当 $N\phi$ 由 10 改变为 15 时，能级基本上不变。这说明从更高态 ($N > 10$) 来的混合是非常小的。当 NG 由 59 改变为 113 时(在 $NG = 59$ 的情形，我们利用 Löwdin-Brust 微扰方法^[9]计人从另外 (113—59) 个平面波来的贡献)，价带中能级不变，导带中能级改变了约 1—3 meV。

在以下的计算中，我们将取 $Ng = 11$, $N\phi = 10$ 和 $NG = 59$ ，久期方程(12)的维数为 $Ng \times N\phi = 11 \times 10 = 110$ 。

四、超晶格的电子子能带

我们利用 [6] 中给出的 Ga, Al, As 的赝势形状因子拟合得到一解析形式的赝势形状因子 $V_i(G)$ 。用这些赝势形状因子计算了 GaAs 和 $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ 的能带，晶格常数取 $a = 5.6389 \text{ \AA}$ 。它们的带边分别为，

$$\text{GaAs: } E_c = 2.6181 \text{ eV}, E_v = 1.1044 \text{ eV}.$$

$$Al_{0.2}Ga_{0.8}As: E_c = 2.8352 \text{ eV}, E_v = 1.0540 \text{ eV}.$$

因此，

$$\Delta E_c / \Delta E_v = 0.81 / 0.19.$$

用赝势方法计算的超晶格 $(GaAs)_{48}(Al_{0.2}Ga_{0.8}As)_{52}$ 的电子子能级 ($k = 0$) 位置连同有效质量方法计算的结果示于表 2。为了一致起见，GaAs 和 $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ 的有效质量是根据赝势计算的导带形状得到的，分别为 $0.0766m_0$ 和 $0.0886m_0$ 。

表2 $(\text{GaAs})_{44}(\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As})_{22}$ 的电子能级 ($k = 0$)。相对于 GaAs 的导带底, 单位: meV

n	势计算	有效质量方法
1	18.25	18.25
2	68.14	71.44
3	142.32	152.63

由表 2 的比较可见, 最低能级 ($n = 1$) 是相同的, 但较高的能级不同。这是由于有效质量方法没有考虑导带的非抛物性。

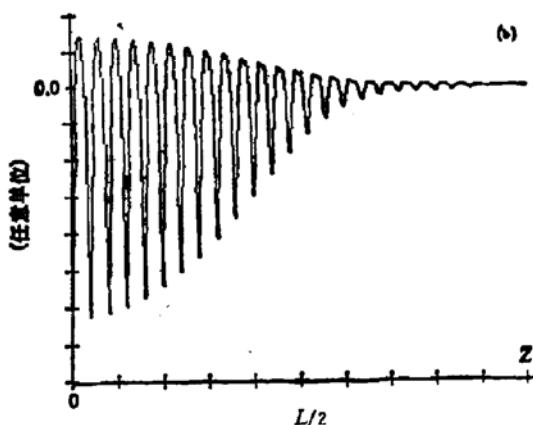


图1 超晶格 $(\text{GaAs})_{44}(\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As})_{22}$ 第一电子能级的波函数虚部沿 x 方向的分布 ($x, y = 0$)。实部具有类似的结构

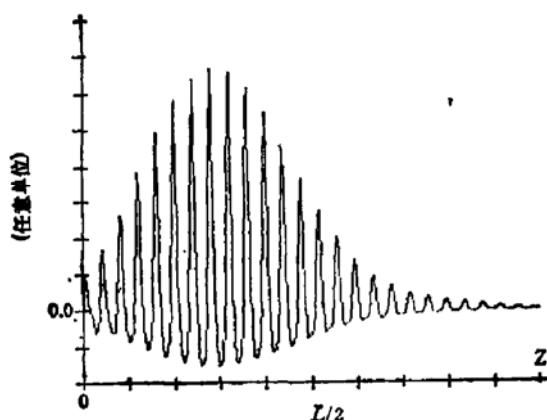


图2 超晶格第二电子能级的波函数实部沿 x 方向的分布

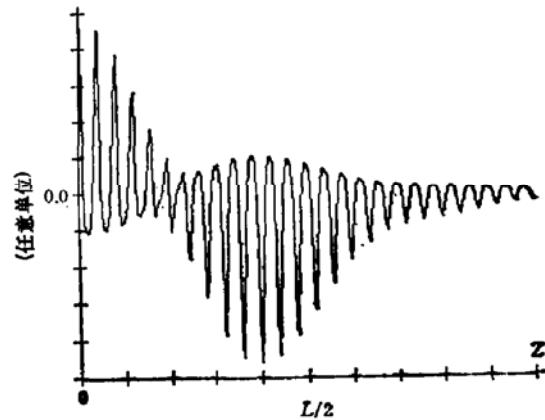


图3 超晶格第三电子能级的波函数虚部沿 x 方向的分布

表3 电子能带在 k_x 平面上的能量色散。能量相对于每一个子带底, 单位: meV

$k_x(2\pi/L)$	[110]				[100]			
	2.0	1.5	1.0	0.5	0.5	1.0	1.5	2.0
$n = 1$	89.86	52.64	23.68	6.17	6.01	23.76	52.50	91.13
$n = 2$	83.39	48.74	21.92	5.76	5.57	21.96	48.60	84.62
$n = 3$	76.14	44.62	20.48	5.91	5.38	20.14	44.22	77.37

超晶格子能带 ($n = 1 \sim 3$) 的 $k = 0$ 态的波函数示于图 1—3 中。由图可见，它们的包络函数在一个周期内分别具有 ($n - 1$) 个节点，并且相对于原点分别为偶的或奇的。此外，在一个晶格常数范围内，它们还有结构，对应于原来的晶体波函数。

电子能带在 k_x 平面内的能量色散示于表 3。由表可见，它们的各向异性是很小的，但是能量色散关系对三个子能带是不同的。这说明导带的非抛物性对电子能带有明显的效果，不能简单地用一个有效质量来代表。

五、超晶格的空穴子能带

利用赝势计算和考虑了价带的自旋轨道耦合效应，我们得到了一系列的空穴子能带，它们在 $k_x = 0$ 处是二重简并的。空穴子能带 ($k = 0$) 相对于价带顶的位置示于

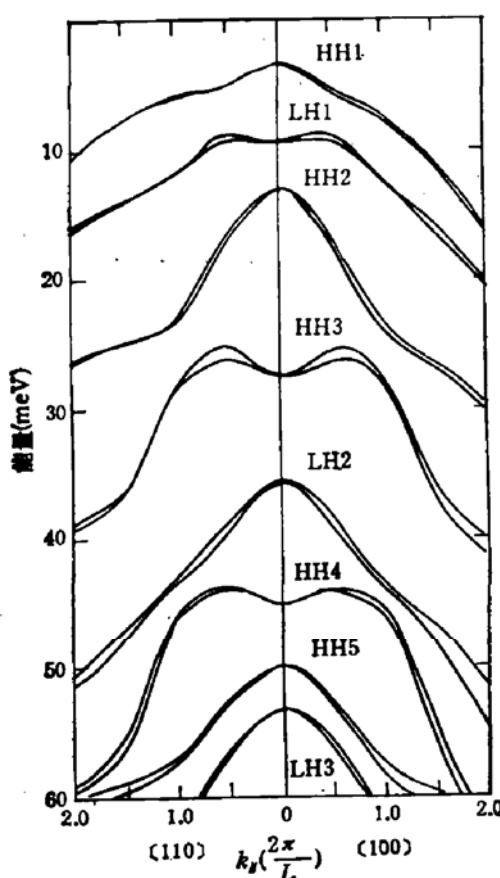


图 4 超晶格 $(\text{GaAs})_{48}(\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As})_{52}$ 的空穴子能带

表 4 $(\text{GaAs})_{48}(\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As})_{52}$ 的空穴子能级 ($k = 0$)。相对于 GaAs 价带顶，二重简并，单位：meV

n	能 量	n	能 量
HH1	-3.28	LH2	-36.21
LH1	-9.58	HH4	-45.71
HH2	-12.92	HH5	-53.37
HH3	-27.75	LH3	-56.16

表4, 它在 \mathbf{k}_\parallel 平面上的能量色散示于图4. 这子带结构类似于紧束缚方法所获得的(见[12], 图1), 但有一点不同: 我们计算得到的 LH1 和 HH2 次序与[12]是相反的. 与其它理论方法的比较(例如有效质量方法), 证明我们的结果是正确的.

我们还计算了在 k_z 方向上的能量色散($0 < k_z < \frac{\pi}{L}$), 发现不论电子, 还是空穴子能带在 k_z 方向上的色散是很小的.

六、光学跃迁矩阵元

超晶格的光吸收系数为^[12](差一常数因子),

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{1}{\omega} \sum_{\mathbf{k}_\parallel k_z} \sum_{nn'} |\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P}_{nn'}(\mathbf{k}_\parallel, k_z)|^2 \delta[E_{n'}(\mathbf{k}_\parallel, k_z) - E_n(\mathbf{k}_\parallel, k_z) - \hbar\omega] \quad (23)$$

其中 $\boldsymbol{\epsilon}$ 是光的偏振方向.

$$\mathbf{P}_{nn'}(\mathbf{k}_\parallel, k_z) = \langle n', \mathbf{k}_\parallel, k_z | \mathbf{P} | n, \mathbf{k}_\parallel, k_z \rangle \quad (24)$$

是超晶格第 n 个子能带与第 n' 个子能带本征态之间的动量矩阵元.

在我们的情况下, 动量矩阵元的计算是直截了当的. 超晶格的波函数能表示为平面波的叠加,

$$\psi_n(\mathbf{k}_\parallel, k_z) = \sum_{G_\parallel G_z g} C_n(\mathbf{G}_\parallel, G_z, g) e^{i(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{G}_\parallel) \cdot \mathbf{r}_\parallel + i(k_z + G_z + g)z} \quad (25)$$

则,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P}_{nn'}(\mathbf{k}_\parallel, k_z) &= \sum_{G_\parallel G_z g} \boldsymbol{\epsilon} \cdot [(\mathbf{k}_\parallel + \mathbf{G}_\parallel) + (k_z + G_z + g)\hat{z}] \\ &\quad \cdot C_{n'}^*(\mathbf{G}_\parallel, G_z, g) \cdot C_n(\mathbf{G}_\parallel, G_z, g) \end{aligned} \quad (26)$$

我们计算了光学矩阵元平方

$$Q_{nn'}(\mathbf{k}_\parallel, k_z) = \frac{2}{m_e} |\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{P}_{nn'}(\mathbf{k}_\parallel, k_z)|^2 \quad (27)$$

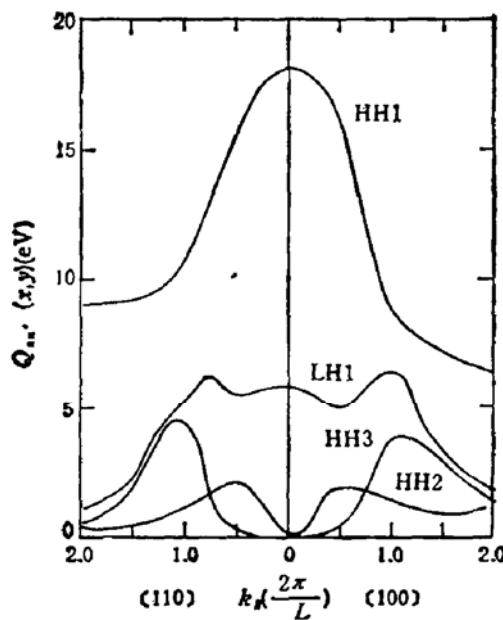
的 (x, y) 和 z 分量. 在计算中, 对两个近似简并的初态(空穴子带)进行了平均. 对简并的末态(电子子带)进行了求和. (x, y) 分量是 x 分量和 y 分量的平均.

表5是光学矩阵元平方($\mathbf{k} = 0$)的 (x, y) 和 z 分量. 由表可见, 超晶格有两类跃迁, 一类是 (x, y) 分量很强, z 分量为零, 这类跃迁发生在重空穴与电子子带之间. 另一类是 z 分量很强, (x, y) 分量约为 z 分量的 $1/4$, 这类跃迁发生在轻空穴与电子子带之间. 选择定则都是 $\Delta n = 0$.

图5列出了各个空穴子能带跃迁至第一个电子子能带(CB1)的光学矩阵元平方的 (x, y) 分量作为 \mathbf{k}_\parallel 波矢的函数. 这结果也类似于紧束缚方法的结果([12]的图3), 但如前所述, 由于 LH1 和 HH2 次序的颠倒, 因此这两个态的曲线有所不同. 当 \mathbf{k}_\parallel 偏离零时, 由于重、轻空穴之间和子带之间的混合效应, 选择定则 $\Delta n = 0$ 不再成立. 对 (x, y) 分量, HH1-CB1 的跃迁减弱, 出现 HH2-CB1 和 HH3-CB1 的跃迁. 对 z 分量, LH1-CB1 的跃迁减弱, 相反地 HH1-CB1 跃迁增强, 甚至超过 LH1-CB1 的跃迁.

表5 光学矩阵元平方 $Q_{xx}(0)$ 的 (x, y) 分量(第一行)和 z 分量(第二行). 单位: eV

n	n'	CB1	CB2	CB3
HH1		18.15 0	0 0	0 0
LH1		5.95 22.06	0.38 0	0.10 0.42
HH2		0.12 0.64	17.18 0	0 0
HH3		0.01 0	0.19 0.41	16.43 0
LH2		0 0	5.82 18.05	0.44 0
HH4		0.01 0.03	0.02 0	0.08 0.09
HH5		0 0	0 0.02	0.05 0
LH3		0.21 0.32	0 0	2.11 6.55

图5 光学矩阵元平方的 (x, y) 分量作为平行波矢 k_x 的函数,末态为 CB1

跃迁 HH1-CB1, HH2-CB2 和 HH3-CB3 的跃迁能量分别为 1.5352, 1.5948 和 1.6838eV, 它们与光吸收实验 ([13] 中图 9, 对 140 Å 的 GaAs 层) 是相符的。

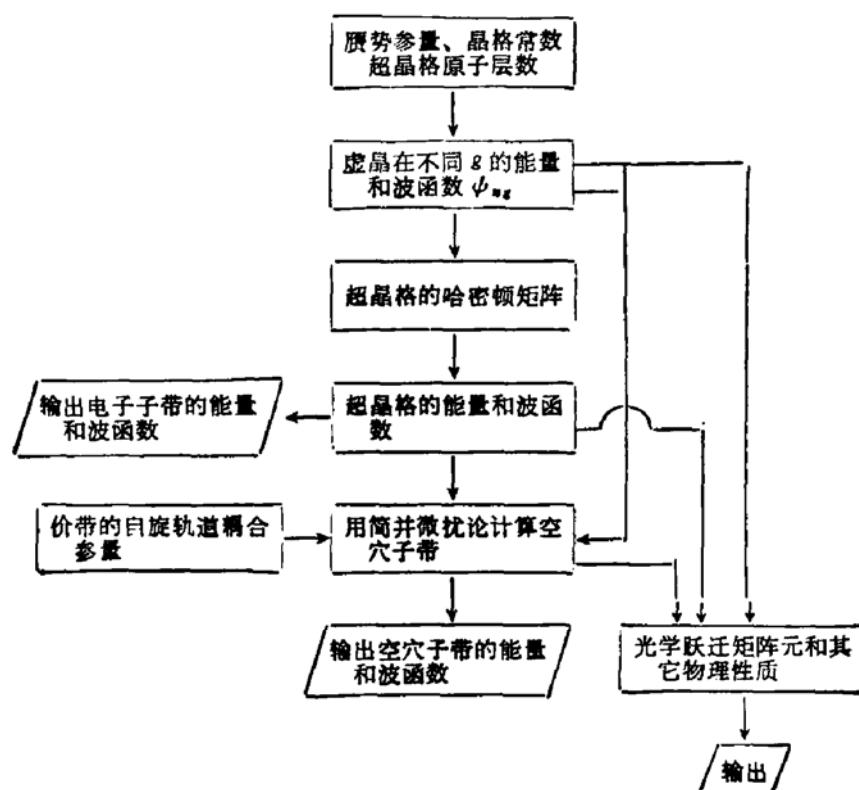
七、结 论

本文提出了一个用赝势计算长周期超晶格的方法。检验了超晶格子能级对 g , G 和 ϕ 数目的收敛性, 利用 11 个 g 和 10 个 ϕ , 就能得到收敛性很好的结果。还考虑了自旋

轨道耦合效应以求得空穴子能带。结果与有效质量方法和紧束缚方法作了比较，主要特征是相同的，但是有一些差别。得到了超晶格量子态的真实波函数，严格地计算了光学跃迁矩阵元。

与其它的理论方法比较，赝势计算方法有下列的优点：

- (1) 唯一的输入参数是赝势形状因子，它们对于许多类的材料都是已知的。
- (2) 它不仅能计算第一类超晶格，而且能计算第二类超晶格。不仅能计算直接能隙超晶格，而且能计算间接能隙超晶格。此外，能带的非抛物性，重、轻空穴的混合效应以及边界条件等等在计算中都自动地考虑了。
- (3) 计算得到的超晶格波函数是真实的波函数，可直接用于计算光学跃迁矩阵元和其它的物理性质。
- (4) 计算的工作量相对来说不是很大，计算过程如下：



参 考 文 献

- [1] S. R. White and L. J. Sham, *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 879(1981).
- [2] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B25**, 7584(1982).
- [3] M. Altarelli, *Phys. Rev.*, **B28**, 842(1983).
- [4] J. N. Schulman and Y. C. Chang, *Phys. Rev.*, **B24**, 4445(1981).
- [5] M. L. Cohen and V. Heine, *Solid State Phys.*, **24**, 37(1970).
- [6] Ed Caruthers and P. J. Lin-Chung, *Phys. Rev.*, **B17**, 2705(1978).
- [7] W. Andreoni and R. Car, *Phys. Rev.*, **B21**, 3334(1980).
- [8] W. E. Pickett, S. G. Louie and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B17**, 815(1978).
- [9] T. Nakayama and H. Kamimura, *Phys. Soc. Japan*, **54**, (1985).
- [10] G. Weisz, *Phys. Rev.*, **148**, 504(1966).
- [11] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B14**, 556(1976).

- [12] Y. C. Chang and J. N. Schulman, *Phys. Rev.*, **B31**, 2069(1985).
[13] R. Dingle, *Festkörperprobleme*, **15**, 23(1975).

Pseudopotential Calculation for the Electronic Structures of Superlattices

Xia Jianbai

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica, Beijing)

A. Baldereschi

(Institute of Applied Physics, EPF-Lausanne, Switzerland and Department of Theoretical Physics and GNSM-CISM, University of Trieste, Italy)

Abstract

A pseudopotential calculation method of superlattice with long period is proposed. The convergence of energy levels to the number of g, \mathbf{G} , and ψ_n are checked. With the small number of g (11) and ψ_n (10), good convergent energy levels of interest are obtained. The spin-orbital coupling effect can also be considered to get the superlattice valence states. The results are compared with other theoretical calculations. The true wavefunctions of superlattice states are obtained, and the optical transition matrix elements are calculated strictly.