

半导体表面附近施主原子电离能计算

刘 振 鹏

(辽宁大学物理系)

1982年7月11日收到

提 要

利用一维化 Euler 方程的方法计算了表面附近施主原子电离能。结果表明,当核处于表面上时,该一维方程具有与 Levine 精确解相匹配的解析解,且定量地符合 Hellmann-Feynman 定理的要求;当核远离表面时,方程的渐近解与自由施主原子一致。

一、引言

如所周知,利用类氢模型计算体内施主原子及激子的电离能得到了较好的结果,而对于表面附近施主原子或激子能级的计算需要考虑到表面势垒的影响,由于半导体的化学亲合势比施主电离能一般约大 1—2 个数量级,根据 Levine^[1] 的分析,作为一个较好的近似,表面势垒的影响可代之以刚性壁的影响,对于这种刚壁模型,当施主核正好在表面上时问题是精确可解的^[1],这时只要保留自由氢原子的具有节面与表面重合的那些解,且将表面外的那部分波函数令其为零即可,因此 Levine 的表面施主原子的电离能将是体内值的 1/4。但当核不在表面上时,由于基本对称性的破坏,一般只能近似求解。Jones^[2] 对一定厚度薄膜(双表面)的情形用变分法作过计算,但他所选用的参数较多,有一定局限性。另一种具有最少参数的简便方法是由 Harper 和 Hilder^[3] 提出的 Green 定理计算法,他们的计算结果虽然在一定程度上与 Evans 和 Young^[4] 及 Dingle 等人^[5] 的实验相符合,但当核距表面的距离 $z_0 \rightarrow 0$ 时电离能不是趋向自由态的 1/4,而是回到自由态的值, Gallardo 和 Mattis^[6] 对 Harper 和 Hilder 的“再循环函数”的选择作了些改进,所得结果虽然当 $z_0 = 0$ 时与 Levine 值相符,但由于他们重新命名的基态能曲线,是由原来的 E_{210} 和 E_{100} 两段曲线对接而成,这样在对接处形成了斜率的突变,且在 $z_0 = 0$ 处 $\frac{dE}{dz_0} > 0$ 违背了 Hellmann-Feynman 定理的要求。

本文从导出再循环函数所满足的 Euler 方程出发,然后将此三维 Euler 方程一维化,再将一维 Euler 方程化成一维 Schrödinger 方程,此方程具有以下特点:①无奇异性便于数值求解。②在 $z_0 = 0$ 处有与 Levine 精确解相匹配的解析解且定量地符合 Hellmann-Feynman 定理。③当 $z_0 \rightarrow \infty$ 时具有渐近地满足边界条件的解析解与自由施主原子一致。④对双表面情形,当两表面间的距离 $L \rightarrow 0$ 时具有满足边界条件的解析解与二维氢原子一致。

二、再循环函数所满足的 Euler 方程及其一维化

以导带底为能量参考点时, 施主原子电子所满足的 Schrödinger 方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V \right) \phi = E\phi \quad (2.1)$$

其中 m^* 为非张量近似中的电子有效质量。势函数 V 按照 Levine 的刚壁模型为

$$V = \begin{cases} -e^2/\kappa r & \text{当 } z > 0 \\ +\infty & \text{当 } z \leq 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

其中

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_0)^2}. \quad (2.3)$$

这里 z_0 为核距表面的距离, κ 为介电常数。由于势 (2.2) 波函数 ϕ 应满足边界条件

$$\phi(x, y, 0) = 0 \quad (2.4)$$

当能量用晶体 Rydberg ($e_0 = m^* e^4 / 2\hbar^2 \kappa^2$), 距离用晶体 Bohr 半径 ($a_0 = \hbar^2 \kappa / m^* e^2$) 为单位时, 方程 (2.1) 化为

$$(-\nabla^2 + V)\phi = E\phi \quad (2.1)'$$

$$V = \begin{cases} -2/r & \text{当 } z > 0 \\ +\infty & \text{当 } z \leq 0 \end{cases}$$

设 Φ 为满足自然边界条件的 Schrödinger 方程(自由氢原子)的解, 其能量本征值为 E' 。令

$$\phi = \chi\Phi \quad (2.5)$$

定义校正函数 χ , 它满足边界条件 $\chi(x, y, 0) = 0$ 。此即 Harper 和 Hilder 定义的再循环函数。由于问题具有轴对称性, 故 m 仍保持为好的量子数, χ 将不修正 L_z 的本征函数 $e^{im\phi}$, 因此 χ 是实函数, 于是将 (2.5) 代入 (2.1)', 利用公式 $\nabla^2 AB = A\nabla^2 B + B\nabla^2 A + 2\nabla A \cdot \nabla B$, 及 Φ 所满足的 Schrödinger 方程就得到

$$-2\nabla\Phi \cdot \nabla\chi - \Phi\nabla^2\chi = \Delta E\Phi$$

其中 $\Delta E = E - E'$ 为表面所引起的能级移动, 两边乘 Φ^* 得

$$-2\Phi^*\nabla\Phi \cdot \nabla\chi - |\Phi|^2\nabla^2\chi = \Delta E|\Phi|^2\chi$$

由上式与其复数共轭方程相加就得到

$$\nabla \cdot (|\Phi|^2\nabla\chi) = -\Delta E|\Phi|^2\chi \quad (2.6)$$

对 (2.6) 两边积分, 注意到 χ 及 Φ 所满足的边界条件就得到

$$\Delta E = \frac{\int_{z=0} \Phi^* \left(\frac{\partial}{\partial z} \Phi \right) dx dy}{\int d^3 r \Phi^* \Phi} \quad (2.7)$$

此即 H-H 及 G-M 文中的 Green 定理公式。现将 (2.6) 两边乘以 χ 后再积分, 利用 Gauss 定理, 得到 ΔE 的另一表达式:

$$\Delta E = \frac{\int d^3 r |\Phi|^2 (\nabla\chi)^2}{\int d^3 r |\Phi|^2 \chi^2} \quad (2.8)$$

上式如果将 ΔE 看成是 χ 的泛函，则不难证明方程(2.6)是泛函(2.8)的 Euler 方程。现考虑如下形式的试探函数

$$\chi = e^{i\lambda z} Q(z) \quad (2.9)$$

其中 λ 是 z_0 的函数，注意到 $\lambda = 1/2$ 且 $Q(z) = z$ 时， $\phi = \chi\Phi_0$ 为 Levine 的基态解。因此(2.9)，(2.5)所确定的 Hilbert 子空间包含了 Levine 的基态解。将上述形式的 χ 代入(2.8)中，可得：

$$\Delta E = \frac{\int_0^\infty dz \left\{ f \left[\lambda^2 Q^2 + \left(\frac{dQ}{dz} \right)^2 \right] + 2\lambda(z - z_0) f_1 Q \frac{dQ}{dz} \right\}}{\int_0^\infty dz f Q^2} \quad (2.10)$$

其中

$$f = \int |\Phi|^2 e^{2iz} dx dy \quad (2.11)$$

$$f_1 = \int |\Phi|^2 \left(\frac{e^{2iz}}{r} \right) dx dy \quad (2.12)$$

求(2.10)的变分，再令 $\delta(\Delta E) = 0$ ，得到了一维化的 Euler 方程。

$$-\frac{d}{dz} \left(f \frac{dQ}{dz} \right) - \lambda \left[f_1 + (z - z_0) \frac{df_1}{dz} \right] Q + \lambda^2 f Q = \Delta E f Q \quad (2.13)$$

再令 $Q = f^{-1/2} Y$ 代入(2.13)中，经过较冗长的运算后得到

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + U \right] Y = \Delta E Y \quad (2.14)$$

为一维形式的 Schrödinger 方程，其中等效势

$$U = \frac{1}{4} \left[\left(\frac{f'}{f} \right)' + \frac{f''}{f} \right] - \lambda \left[\frac{f_1}{f} + (z - z_0) \frac{f_1}{f} \right] + \lambda^2 \quad (2.15)$$

将基态的 Φ 函数 Φ_0 代入(2.11)和(2.12)中可得

$$f = A e^{-2(1-\lambda)t} \left[t + \frac{1}{2(1-\lambda)} \right] \quad (2.16)$$

$$f_1 = A e^{-2(1-\lambda)t} \quad (2.17)$$

其中 $t = |z - z_0|$ ， A 为公共的常数因子，将(2.16)和(2.17)代入(2.15)，经整理后得：

$$U = 1 - \frac{1 + \lambda}{t + \frac{1}{2(1-\lambda)}} - \frac{1}{4 \left[t + \frac{1}{2(1-\lambda)} \right]^2} \quad (2.18)$$

图 1 表示两种极限情形的等效势 $U(s_0)$ 与 $t(a_0)$ 的关系。实线为 $\lambda = 0$ (对应于 $z_0 \rightarrow \infty$) 的等效势，极小值在 $t = 0$ 处， $U_{\min} = -2$ 。虚线为 $\lambda = 1/2$ (对应于 $z_0 = 0$) 的等效势， $U_{\min} = -0.75$ 。对于 z_0 的其它值 λ 在 $(0, 0.5)$ 之间，等效势具有类似的特点，其极小值在 -0.75 与 -2 之间，且没有奇异性。当 $t \rightarrow \infty$ 时 $U \rightarrow 1$ ，于是方程(2.14)的解具有如下的渐近行为 ① 束缚态，当 z_0 固定 $z \rightarrow \infty$ 时 $Y \sim e^{-kt}$ k 为正实数，其本征值为 $\Delta E = 1 - k^2 < 1$ 。② 散射态，当 z_0 固定 $z \rightarrow \infty$ 时 $Y \sim a \sin(kz + \eta_1) + b \sin(-kz + \eta_2)$ ，代表相对于表面的反射波和入射波，此时本征值为

$$\Delta E = 1 + k^2 \geq 1.$$

当 $z_0 = 0$ 时取 $\lambda = 1/2$, 则等效势为

$$U = 1 - \frac{3}{2(z+1)} - \frac{1}{4(z+1)^2} \quad (2.18)'$$

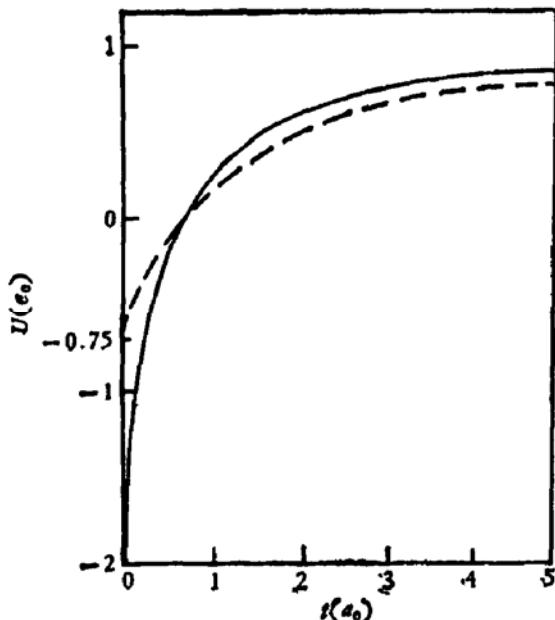


图 1 等效势 U (单位为 $e_0 = m^*e^4/2\hbar^2\kappa^2$) 与 z (单位为 $a_0 = \hbar^2\kappa/m^*e^2$) 的关系, 实线为 $\lambda = 0$ ($z_0 \rightarrow \infty$) 的情形, 虚线为 $\lambda = 1/2$ ($z_0 = 0$) 的情形

则不难验证, 方程 (2.14), (2.18)' 具有满足边界条件的归一化解

$$Y = \frac{1}{2\sqrt{2}} z \sqrt{z+1} e^{-\frac{1}{2}z} \quad (2.19)$$

其本征值为 $\Delta E = 3/4$, 则电离能 $e_I = 1 - \Delta E = 1/4$, 与 Levine 的精确值相同, 另一方面由 Hellmann-Feynman 定理^[7]可以算得

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\Delta E}{dz_0} \right)_{z_0=0} &= \int_0^\infty dz Y^2 \frac{\partial V}{\partial z_0} \\ &= -\frac{1}{8} \end{aligned} \quad (2.20)$$

与用 Levine 基态波函数及库伦势 (2.2)' 所算得的结果相同, 因此一维方程 (2.14), (2.18) 在 $z_0 = 0$ 处是精确的。当 $z_0 \rightarrow \infty$ 时横向修正因子 λ 可忽略, 这时

$$U = 1 - \frac{1}{z+1/2} - \frac{1}{4(z+1/2)^2} \quad (2.18)''$$

这时方程 (2.14), (2.18)'' 具有渐近满足边界条件的解析解

$$Y = \sqrt{z+1/2} e^{-z} \quad (2.21)$$

其本征值 $\Delta E = 0$, $e_I = 1$, 与自由氢原子一致。

三、 ΔE 的渐近行为

当 $z_0 \rightarrow \infty$ 时, $\lambda \rightarrow 0$, 这时方程 (2.13) 变成

$$-\frac{d}{dz} \left(f \frac{dQ}{dz} \right) = \Delta E f Q \quad (3.1)$$

在区间 $(0, \infty)$ 积分上式, 注意到 f 及 $Y = f^{1/2}Q$ 的渐近行为, 可知 $\lim_{z \rightarrow \infty} \left(f \frac{dQ}{dz} \right) = 0$, 则有

$$f \frac{dQ}{dz} = \Delta E \int_z^\infty dz' f(z') Q(z')$$

由于 $f \neq 0$ 故上式除 f 后从 0 到 z 积分得

$$Q(z) = \Delta E \int_0^z dz' [f(z')]^{-1} \int_{z'}^\infty dz'' f(z'') Q(z'') \quad (3.2)$$

以上为 Q 所满足的包含边界条件的积分方程, 对方程 (2.14) 来说基态 Y 不变号^[8], 由于 f 不变号, 故 Q 不变号, Q 可取为大于零, 由于 f 大于零, 于是 (3.2) 的被积函数恒大于

零，而由(2.8)可知 $\Delta E \geq 0$ ，因此由(3.2)可知 $Q(z)$ 不仅大于零，而且是 z 的单调上升函数。

将(3.2)两边乘 f 后积分得到

$$\Delta E = \frac{\int_0^\infty dz f(z) Q(z)}{\int_0^\infty dz f(z) \int_0^z dz' [f(z')]^{-1} \int_z^\infty dz'' f(z'') Q(z'')} \quad (3.3)$$

将(2.16)的具体 f 代入(3.3)中可算得

$$\begin{aligned} \text{分子} &= \left(\int_0^{z_0} + \int_{z_0}^\infty \right) dz f Q = Q(z_1) \int_0^{z_0} f dz + Q(z_2) \int_{z_1}^\infty f dz \\ &= \frac{1}{2} [1 - e^{-2z_0}(z_0 + 1)] Q(z_1) + \frac{1}{2} Q(z_2) \end{aligned} \quad (3.4)$$

这里 $z_2 > z_0 > z_1$ ，故 $Q(z_2) > Q(z_1)$ ，(3.3)的分母可写成

$$\text{分母} = I_1 + I_2 + I_3 + I_4 \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} I_1 &= \left\{ \int_0^{z_0} dz f \int_0^z dz' f^{-1} + \int_{z_0}^\infty dz f \int_0^{z_0} dz' f^{-1} \right\} \int_{z_0}^\infty f Q dz \\ &= \left\{ \int_0^{z_0} \frac{e^{2z}}{z + 1/2} dz + O_1(z_0) \right\} \frac{Q(z_0)}{2} \\ I_2 &= \int_0^{z_0} dz f \int_0^z dz' f^{-1} \int_{z'}^{z_0} dz'' f Q = Q(z_3) \int_0^{z_0} \cdots \int_0^z \cdots \int_{z'}^{z_0} dz'' f(z'') \\ &= Q(z_3) \left[\frac{1}{4} \int_0^{z_0} \frac{e^{2z}}{z + 1/2} dz + O_2(z_0) \right] \\ I_3 &= \int_{z_0}^\infty dz f \int_0^{z_0} dz' f^{-1} \int_{z'}^{z_0} dz'' f Q = Q(z_4) \int_{z_0}^\infty \cdots \int_0^{z_0} \cdots \int_{z'}^{z_0} dz'' f(z'') \\ &= \frac{Q(z_4)}{4} \left[\int_0^{z_0} \frac{e^{2z}}{z + 1/2} dz + O_3(z_0) \right] \\ I_4 &= \int_{z_1}^\infty dz f \int_{z_0}^z dz' f^{-1} \int_{z'}^\infty dz'' f Q \\ &= -\frac{1}{4} \left(z_0 - \frac{\ln 2}{2} \right) (Q(z_2) - Q(z_1)) \\ &\quad + \frac{1}{4} \left[1 + \frac{1}{4} \int_0^\infty \frac{e^{-2z}}{z + 1/2} dz \right] Q(z_2). \end{aligned}$$

其中 z_3, z_4 满足 $0 < z_3 < z_0$, $0 < z_4 < z_0$, $O_1(z_0)$ 和 $O_2(z_0)$, $O_3(z_0)$ 为当 $z_0 \gg 1$ 时量级不大于 z_0 的函数而 z_5 由下式确定

$$Q(z_5) = \frac{\int_{z_0}^\infty dz f(z) \left[z + \frac{1}{2} \ln \left(z - z_0 + \frac{1}{2} \right) \right] Q(z)}{\int_z^\infty dz f(z) \left[z + \frac{1}{2} \ln (z - z_0 + 1/2) \right]}$$

相当于 $Q(z)$ 在以 $\varphi(z) = f(z) \left[z + \frac{1}{2} \ln (z - z_0 + 0.5) \right]$ 为分布函数，在区间 (z_0, ∞) 内的平均值，而 $Q(z_5)$ 则为同一区间内对 f 的平均值，注意到 f 在 $z > z_0$ 时是指数下降函数，则当 z_0 很大时不难看出 φ 在 $z > z_0$ 段具有比 f 更陡的下降斜率，其权重更靠近 z_0 ，

由此可见 $z_5 < z_2$ 。将以上结果代入(3.5)及(3.3)中得到

$$\Delta E = \frac{1 + r_1 - r_1(1 + z_0)e^{-2z_0}}{\left(1 + \frac{1}{2}r_3 + \frac{1}{2}r_4\right) \int_0^{z_0} \frac{e^{2z}}{z + 0.5} dz + O(z_0)} \quad (3.6)$$

其中 $r_i = Q(z_i)/Q(z_2)$ $i = 1, 3, 4, 5$, 且满足不等式 $0 < r_i < 1$ ($i = 1, 3, 4$), 及当 $z_0 \gg 0$ 时 $0 < r_5 < 1$, 于是当 $z_0 \rightarrow \infty$ 时(3.6)变为

$$\Delta E \approx \frac{B}{2} \left(\int_0^{z_0} \frac{e^{2z}}{z + 0.5} dz \right)^{-1} \approx B z_0 e^{-2z_0} \quad (3.7)$$

$$B = \frac{2(1 + r_1)}{1 + \frac{1}{2}r_3 + \frac{1}{2}r_4} \quad (3.8)$$

常数 B 的数值为 $1 < B < 4$.

四、计算结果及讨论

方程(2.12), (2.18)当 z_0 为任意值时可以方便地进行数字求解, 其步骤是首先对固定的 z_0 值给定一个 λ 及 ΔE 数值, 求方程满足 $z = 0$ 处的边界条件的解, 由 $z \rightarrow \infty$ 时 Y 的渐近行为来判断 ΔE 是否是方程的本征值^[3], 当 ΔE 太大时 $Y \rightarrow -\infty$, 太小时 $Y \rightarrow +\infty$, 调节 ΔE 可得到一定精度内的本征值, 然后再改变 λ 使得到的 ΔE 为最小, 即为该 z_0 值处的能级移动. 具体解法采用常微分方程数字解法中的 Runge-Kutta-Gill 方法求解方程(2.12)及(2.18), 只要将相应的标准程序稍加修改以适于求解本征值问题即可顺利地进行. 边界点的数值取 $z = 0 Y = 0, Y' = 1$, 由于 $z = 0$ 处 Y' 的数值只改变归一化常数并不影响解的渐近行为故可方便地取作 1.

数字计算结果表示在图 2 及图 3 中. 由图 1 可知 λ 的大小决定势阱的深度及扩展范围, λ 小则势阱深但较陡, 反之 λ 大势阱浅但扩展范围大. 当 $z_0 \rightarrow \infty$ 时, 波函数的峰值正好处在势阱中心, 显然 λ 小对减小平均势能有利, 故 $\lambda = 0$ 使 $\Delta E = 0$, 在一般情况下由于表面的排斥作用, 使波函数峰值偏离势阱中心, 显然这时使平均势能最小的 λ 值将应该是大于零的某值. 由图 3 可以看出当 $z_0 > 1$ 时 λ 的影响已小到可忽略的程度.

以上方法可推广运用到对激发态能移的计算, 例如对能移 $\Delta E_{21\pm 1}$ 来说, 用类似的方法可以找到相应的等效势为

$$U_{21\pm 1} = \frac{1}{4} - \frac{(1 + 2\lambda)t + 1.5 + \frac{4\lambda}{1 - 2\lambda}}{F} + \frac{3}{4(1 - 2\lambda)^2 F^2} \quad (4.1)$$

$$F = t^2 + \frac{3t}{1 - 2\lambda} + \frac{3}{(1 - 2\lambda)^2} \quad (4.2)$$

当 $z_0 = 0$ 时取 $\lambda = 1/6$, 则得

$$U_{21\pm 1} = \frac{1}{4} - \frac{\frac{4}{3}z + 2.5}{F_0} + \frac{27}{16F_0^2} \quad (4.1)'$$

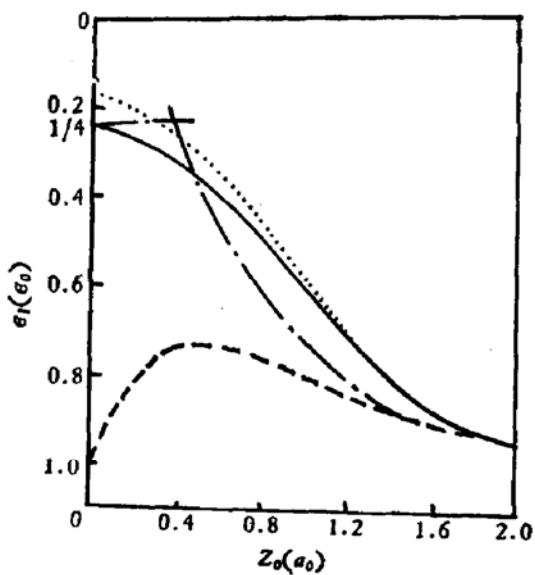


图2 施主电离能 $e_I = 1 - \Delta E$ 与核距表面距离 z_0 的关系, 实线为方程(2.14), (2.18)的数字解, 点线是 $\lambda = 0$ 的数字解, 虚线是 Harper-Hilder 的结果, 点划线是 Gallardo-Mattis 的结果

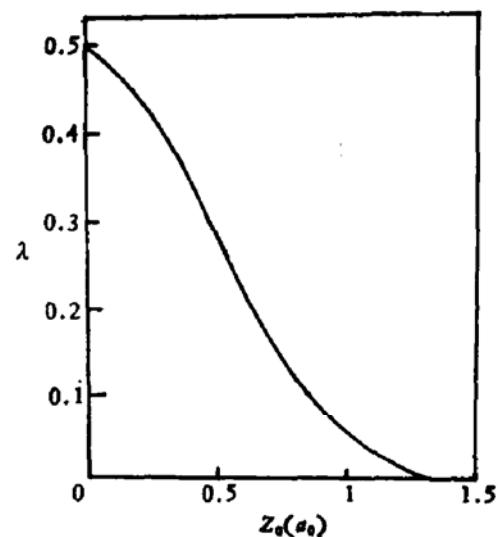


图3 横向修正因子 λ 与核距表面的距离 z_0 的关系

$$F_0 = z^2 + \frac{9}{2}z + \frac{27}{4} \quad (4.2)'$$

其满足边界条件的解析解为 $Y = z F_0^{1/2} e^{-\frac{1}{2}z}$, 相应的本征值为 $\Delta E_{21\pm 1} = \frac{1}{4} - \frac{1}{9}$, 恰好是自由氢原子第二和第三激发态的能级差, 这与 Levine 的第一激发态 $\Phi_{32\pm 1}$ 相匹配, 而当 $z_0 \rightarrow \infty$ 时有渐近地满足边界条件的解析解, $Y = (t^2 + 3t + 3)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}t}$, 本征值为 $\Delta E_{21\pm 1} = 0$. 与自由氢原子的 $\Phi_{21\pm 1}$ 相对应, 所以方程(4.1), (4.2)对任意 z_0 时的数字解将给出较好的激发态能移. 可以验证以上方法适合所有满足 $|m| = n - 1$ 的各激发态能移计算, 它们都能做到在 $z_0 = 0$ 时与相应的 Levine 态一致, $z_0 \rightarrow \infty$ 时与自由态一致的结果. 对一般情形则需要把 Hilbert 子空间适当扩大才能达到“两个一致”的结果. 而且有趣的是任何一个满足表面选择定则 $l + m =$ 奇数的 Levine 态 (n, l, m) 都有一个自由态 $(n - 1, l - 1, m)$ 与之相对应, 当 z_0 从 $0 \rightarrow \infty$ 时 $\Phi_{n,l,m} \rightarrow \Phi_{n-1,l-1,m}$.

以上方法可直接用于双表面薄膜或双界面量子阱^[10]的情形, 当薄膜厚度 $L \rightarrow 0$ 时, 等效势(2.18)中的 $t \rightarrow 0$, 于是满足边界条件的解为 $Y \approx \sin\left(\frac{\pi}{L}z\right)$, 则满足 $\frac{\partial \Delta E}{\partial \lambda} = 0$ 的 $\lambda = -1$, 相应的 $\Delta E = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 - 3$, 注意到自由电子的能量最小值为 $\left(\frac{\pi}{L}\right)^2$, 因此得到束缚能 $e_B = 4$, 与二维氢原子的结果一致^[11], 同样令(4.1)中的 $t \rightarrow 0$ 可求得第一激发能为 $-\frac{4}{9}$. 因此上述方法对双表面情形可作为二维模型的补充. 此外对各向异性及表面附近有电场(如反型层中的施主电子态)或磁场(垂直于表面)的情形, 用此方法计算也将是一个较简便的途径.

沈阳计算所李作新同志对本工作的数字计算方面给予了热心的帮助特此致谢.

参 考 文 献

- [1] J. D. Levine, *Phys. Rev.*, **140**, A, 586(1965).
- [2] G. Jones, *Phys. Rev.*, **B4**, 2069(1971).
- [3] P. G. Harper and J. A. Hilder, *Phys. Status. solidi*, **26**, 69(1968).
- [4] B. L. Evans and P. A. Young, *Proc. Roy. Soc.*, **248A**, 402(1965); **298A**, 74(1967).
- [5] R. Dingle, W. Wiegmann and C. H. Henry, *Phys. Rev., Letters*, **33**, 827(1974).
- [6] J. Gallardo and D. Mattis, *Phys. Status Solidi (b)*, **93**, 229(1979).
- [7] F. Garcia-Moliner and F. Flores, *Introduction to the Theory of Solid Surfaces*, Cambridge University Press, p. 346(1979).
- [8] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Third-edition, Pergamon Press, p. 60 (1977).
- [9] H. A. Kramers, *Quantum Mechanics* North-Holland Publishing Company-Amsterdam, p. 54 (1957).
- [10] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B24**, 4714(1981).
- [11] M. Shinada, and S. Sugano, *J. Phys. Soc. Japan*, **21**, 1936(1966).

Calculation of the Ionization Energy of a Donor Atom near a Semiconductor Surface

Liu Zhenpeng

(*Department of Physics, Liaoning University*)

Abstract

The Method of one-dimensionalised Euler's equation is used to calculate the ionization energy of a donor atom near a semiconductor surface. The results show that, when the nucleus is located at the surface, the one-dimensional equation has an analytical solution matching with Levine's exact solution and is in agreement with Hellmann-Feynman theorem quantitatively, when the nucleus is far from the surface, the asymptotic solution of the equation coincides with that of the free donor atom.