

半导体量子阱和量子线中杂质束缚能的度规法则与维里定理^{*}

刘建军^{1,2} 苏 会¹ 杨国琛²

(¹ 河北师范大学物理学院, 石家庄 050016)

(² 河北工业大学物理所, 天津 300130)

摘要: 利用变分法计算了矩形量子线和量子阱中类氢杂质束缚能的度规法则和维里定理值. 计算结果表明: 确实存在一个参数(杂质有效玻尔半径) 可用来完全确定束缚能的值, 而不必考虑截面的形状和尺寸; 体系的维里定理值并不等于常数, 而是随杂质有效玻尔半径变化, 在阱宽较小和较大时, 维里定理值都趋于 2.

关键词: 度规法则; 维里定理; 量子阱; 量子线; 杂质

PACC: 7865; 7320D; 7115P

中图分类号: O471.1

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2002)09-0925-05

1 引言

在实验上, 随着晶体生长技术(如化学气相淀积、液相外延及分子束外延等)的发展, 人们可以制备出尺寸与电子的德布罗意波长相比拟的半导体低维量子结构, 此时必须考虑量子尺寸效应, 其影响到半导体材料中电子的物理性质. 在过去的十几年中, 低维半导体异质结构(量子阱、量子线)中的类氢杂质得到了大量的研究, 内容主要集中在低维结构的尺寸对杂质态束缚能的影响^[1~11]. 最近, Rossi 等人^[12]通过求解推广的布洛赫方程, 研究了在横截面为 V 形和 T 形的量子阱线内激子的束缚能, 在定义了有效激子玻尔半径的条件下, 得出量子阱线中激子的束缚能随激子有效玻尔半径的变化与截面形状无关, 仅与激子有效玻尔半径有关; 且对于相同的激子有效玻尔半径, 量子线中的激子束缚能要大于量子阱中束缚能. 由此提出了度规法则: 激子的束缚能只是激子有效玻尔半径的函数, 量子阱线的尺寸和形状对束缚能的影响表现为束缚能对激子有效玻尔

半径的相关性. 他们将这种结果归因于在量子阱中的维里定理值等于常数 2, 而量子线中的维里定理值等于常数 4. 后来, 张勇等人^[13]采用变分法计算了无限深量子线(圆形、方形截面)中激子束缚能的度规法则及维里定理. 他们的结果表明: 度规法则确实存在, 但维里定理值并非常数, 而是随激子有效玻尔半径变化而变化, 这与文献^[12]的结论完全不同.

本文基于以上对激子问题的研究, 讨论了量子阱、矩形量子线中类氢杂质态束缚能的度规法则及维里定理值. 因为杂质态是激子中空穴的质量为无限大的极限情况, 所以对类氢杂质体系应存在相似的能量度规法则. 我们采用变分法计算了无限深量子阱和矩形截面量子线中杂质态的束缚能, 并考虑了矩形截面不同长宽比的情况. 类似地定义了杂质有效玻尔半径 $a_{im} = \langle 1/r \rangle^{-1}$, 对类氢杂质的计算结果表明, 在量子线中同样存在不依赖于截面形状与尺寸的度规法则, 结果与文献^[13]的结论非常一致. 同时我们还计算了维里定理值随杂质有效玻尔半径的变化情况, 发现我们的结果比文献^[12]和^[13]的

* 河北省自然科学基金(No. 199181) 及河北省教育厅自然科学基金(No. 200104) 资助项目

刘建军 男, 1962 年出生, 教授, 博士研究生, 从事半导体超晶格物理和功能材料研究.

苏 会 女, 1977 年出生, 硕士, 从事半导体超晶格物理研究.

杨国琛 男, 1935 年出生, 教授, 博士生导师, 从事相变和功能材料研究.

2001-12-18 收到, 2002-01-24 定稿

结论更合理,在讨论维里定理值问题上对文献[13]作出了重要补充.

2 模型与计算

为简单起见,我们考虑势垒为无限大的情况,假定类氢杂质位于量子阱(线)的中心.在有效质量近似下,体系的哈密顿为

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_e^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} + V_0 \quad (1)$$

其中对量子线

$$V_0(x, y) = \begin{cases} 0, & |x| < L_x/2, \quad |y| < L_y/2 \\ \infty, & \text{其它区域} \end{cases} \quad (2)$$

对量子阱

$$V_0(z) = \begin{cases} 0, & |z| < L/2 \\ \infty, & \text{其它区域} \end{cases} \quad (3)$$

其中 m_e^* 是电子的有效质量; ϵ 为介电常数; $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ 是电子与施主杂质离子间的距离.若采用玻尔半径 $a^* = \epsilon \hbar^2 / m_e^* e^2$ 和 Rydberg 能量 $R_y^* = e^2 / 2 \epsilon$ 分别为长度单位和能量单位,则体系的哈密顿可简化为

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{r} + V_0 \quad (4)$$

显然方程(4)不存在解析解,在此采用变分法求解,我们选基态波函数如下:

对量子线^[2,9]

$$\Psi(\vec{r}) = N_1 \cos\left(\frac{\pi}{L_x}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{L_y}y\right) e^{-\lambda r} \quad (5)$$

对量子阱

$$\Psi(\vec{r}) = N_2 \cos\left(\frac{\pi}{L}z\right) e^{-\lambda r} \quad (6)$$

其中 $N_1(N_2)$ 是归一化常数; λ (λ) 为变分参数.类氢杂质的基态能为

$$E(\lambda) = \frac{\int \Psi^* H \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau} \quad (7)$$

将以上(4)、(5)和(6)式分别代入(7)式,根据变分理论,对 $E(\lambda)$ 求极小值,从而得到杂质的基态能,即杂质电子的束缚能为

$$E_{b(\text{wire})} = E_{11} - \min E(\lambda) \quad (8)$$

$$E_{b(\text{well})} = E_1 - \min E(\lambda) \quad (9)$$

其中 $E_{11} = \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2}$, $E_1 = \frac{\pi^2}{L^2}$

矩形量子线(考虑了三种不同的长宽比 $\gamma = L_y/L_x = 1, 2, 3$) 中杂质的束缚能,在图1中给出了束缚能随阱宽的变化曲线.

类似于文献[12]和文献[13],我们定义杂质有效玻尔半径

$$a_{\text{im}} = \langle 1/r \rangle^{-1} \quad (10)$$

将束缚能随杂质有效玻尔半径的变化曲线绘于图3(此处及全文中 $\langle \dots \rangle$ 表示在杂质基态的期待值).同样得出势能与动能的平均值: $\langle V \rangle = \langle -2/r \rangle$ 和 $\langle K \rangle = \langle H \rangle - \langle V \rangle - E_e$. 维里定理值即为势能与动能的比值 $-\langle V \rangle / \langle K \rangle$. 又因为 $E_b = E_e - \min \langle H \rangle$, 所以有 $\langle K \rangle = -\langle V \rangle - E_b$, 其中 $\langle V \rangle = -2a_{\text{im}}^{-1}$.

我们选取 GaAs 材料中的参数如下: $\epsilon = 12.58$, $m_e^* = 0.0665m_0$ ^[9], m_0 是自由电子的质量,从而得到长度单位及能量单位的值为 $a^* \approx 10\text{nm}$, $R_y^* \approx 5.72\text{meV}$.

3 结果与讨论

图1给出矩形量子阱线中杂质束缚能随线宽 L_x 的变化曲线,其中不同的曲线对应不同线宽截面的长宽比 $\gamma = L_y/L_x$. 从图1我们可以看到:当 $L_x \rightarrow 0$ 或 $L_x \rightarrow \infty$ 时,不同长宽比的量子线中杂质束缚能变化趋势相同,其原因是我们采用了无限深势阱的模

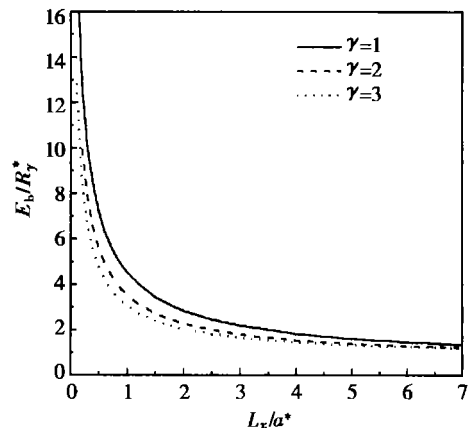


图1 不同截面长宽比时束缚能随阱宽的变化

Fig.1 Binding energy as a function of wire width L_x for three different section ratios

型. 当 $L_x \rightarrow 0$ 时,电子由于势阱的限制,受到杂质离子强烈的束缚,因而 E_b 趋于无穷大;当 $L_x \rightarrow \infty$ 时,量子线接近于体材料,势阱的限制几乎不影响束缚能的大小,且 $E_b \rightarrow R_y^*$. 在这两种极限情况下,不同

的长宽比截面几乎对束缚能不产生影响. 但是对于中间尺寸, L_x 固定, γ 越大 (即 L_y 越大), E_b 越小. 因为电子在截面尺寸稍大的阱线中受到的束缚要弱一些. 我们将所得结果与文献[9] (不加电场时) 的几个特定阱宽的结果作了比较 (见表 1), 可以看出它们符合得很好.

表 1 量子阱线中的杂质的束缚能与文献[9]的比较
 E_b 和 E_b' 分别为本文和文献[9]的结果.

Table 1 Binding energy in rectangular wires compared to Ref. [9] E_b and E_b' denote the results of this paper and Ref. [9], respectively.

$\gamma=L_y/L_x$	1		2
L_x/a^*	0.5	1.0	1.0
E_b/R_y^*	7.126	4.518	3.515
E_b'/R_y^*	7.153	4.538	3.508

图 2 给出在三种不同长宽比的矩形量子阱线中杂质有效玻尔半径 a_{im} 随阱宽 L_x 的变化曲线. 随着 L_x 的增大, a_{im} 也逐渐增加, 但二者并不呈线性关系. 随着 L_x 的增加, a_{im} 逐渐趋近于 a^* (体材料中杂质的玻尔半径). 对于 L_x 一定, γ 值大, a_{im} 要稍大一些. 与图 1 中阱宽变化时, 束缚能与有效玻尔半径的变化趋势相反, 这是由于 a_{im} 实际上表示电子的平均运动范围, a_{im} 增大, 电子运动范围大一些, 从而受到杂质离子的束缚弱一些, 相应地束缚能减小.

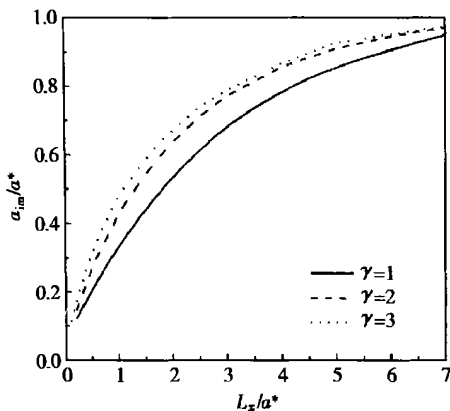


图 2 杂质有效玻尔半径随阱宽的变化

Fig. 2 Impurity effective Bohr radius a_{im} versus wire width L_x for different section ratios

图 3 是量子阱和量子线中杂质束缚能随着杂质有效玻尔半径 a_{im} 的变化曲线. 可以看到, 对于三种

不同长宽比的矩形量子阱线情况, 三组数据几乎落在同一曲线上, 这说明束缚能仅由杂质的有效玻尔半径决定, 对于杂质体系同样存在束缚能的度规法则: E_b 不依赖于量子线截面的尺寸, 只与杂质的有效玻尔半径 a_{im} 有关. 同时对于相同的 a_{im} , 线中杂质束缚能要大于阱中的束缚能. 因此, 可用杂质有效玻尔半径 a_{im} 作为一个标识束缚能的特征参数, 杂质束缚能随 a_{im} 的变化体现了量子线截面的不同尺寸对束缚能产生的影响. 尽管所采用的量子线截面形状和尺寸不同, 我们的结论仍与文献[12]和[13]是一致的.

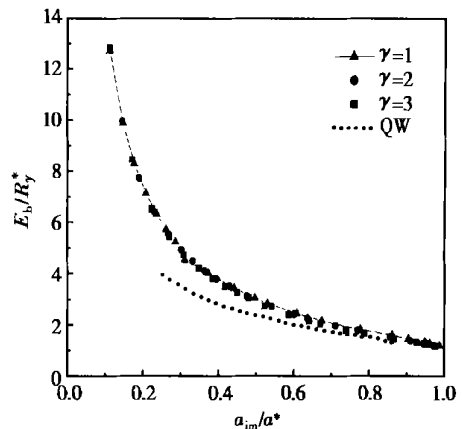


图 3 量子阱和量子线中束缚能随杂质有效玻尔半径的变化

Fig. 3 Binding energy as a function of the impurity effective Bohr radius in quantum well and wires

图 4 给出了维里定理值随杂质有效玻尔半径的变化情况. 维里定理值的变化范围是从 2.0 到 4.2, 在某一特定的 a_{im} 值上维里定理值存在极大, 这一结果明显不同于文献[12] (直线) 和文献[13] (无极值). 对相同的杂质有效玻尔半径, 量子线中的维里定理值大于阱中的, 并且对于一定的 a_{im} , γ 越大, 量子线中的维里定理值越小, 对此我们给出以下物理分析.

在理想的一维、二维、三维结构中, 对于杂质体系, 只存在电子和施主离子间的平方反比库仑力, 根据维里定理 $2\langle K \rangle = \langle \vec{r} \cdot \nabla V \rangle^{[4]}$, 很容易得到 $-\langle V \rangle / \langle K \rangle = 2$. 而由于同时存在势阱的限制时, 维里定理值仍为常数显然不合理. 当杂质有效玻尔半径从 0 变化到 a^* , 量子线从纯一维变化到体结构 (三

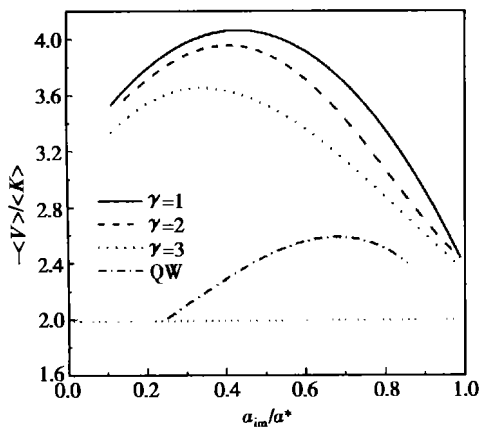


图4 量子阱线中维里定理值随杂质有效玻尔半径的变化

Fig. 4 Virial theorem value versus impurity effective Bohr radius in quantum well and wires

维), 在这两种极限情况下, 维里定理值应趋于 2, 正如图 4 所示. 因此文献[12]中的量子线中维里定理值为常数 4 并不能反映实际的物理图象, 只能是一种特殊的情况. 文献[13]中的结果是维里定理值随激子玻尔半径单调增加, 其原因主要是他们选用变分波函数时, 忽略了限制方向与非限制方向的耦合, 而这种耦合只能在阱宽较窄时才能忽略不计^[15].

对于一定的有效玻尔半径, 量子线中的维里定理值要大于量子阱中的值, 我们可以从杂质有效玻尔半径的定义来分析. 若以 a_{im} 作为变量, 则在两种结构中维里定理值的不同就体现在 $\langle K \rangle$ 的差别上, 因为 $a_{im} = \langle 1/r \rangle^{-1} = -2\langle V \rangle^{-1}$ 一定, $\langle V \rangle$ 就固定. 对一给定值 a_{im} , 在量子线中电子和施主离子在非限制方向上的分离要大于阱中的情况^[13], 又由于 $\langle K \rangle$ 的大小与分离距离成反比, 所以阱中的平均动能要大于线中的平均动能, 从而线中的维里定理值 $-\langle V \rangle / \langle K \rangle$ 要大于阱中的维里定理值. 同理, 对于不同长宽比截面的量子线, γ 较大时, $\langle K \rangle$ 也较大, 因而相应的维里定理值要小.

4 结论

本文采用变分法计算了无限深量子阱和量子线中杂质态的束缚能, 讨论了量子阱线中不依赖于截面尺寸的能量度规法则, 即杂质的束缚能仅与杂质有效玻尔半径有关, 截面尺寸变化对束缚能的影响可归结为杂质有效玻尔半径的变化对束缚能的影

响. 同时还讨论了体系的维里定理值随有效玻尔半径的变化情况, 由于考虑了限制方向与非限制方向的耦合, 所得结果比前人工作更合理.

参考文献

- [1] Bryant G W. Hydrogenic impurity in a quantum-well wire. *Phys Rev B*, 1983, 29(12): 6632
- [2] Brum J A. Position-dependence of the impurity binding energy in quantum well wires. *Solid State Commun*, 1985, 54: 179
- [3] Brown J W, Spector H N. Hydrogenic impurities in quantum well wires. *J Appl Phys* 1985, 59(4): 1179
- [4] Li Shushen, Jiao Shanqing. Binding energy calculation of hydrogenic impurities in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum well in vertical magnetic field. *Chinese Journal of Semiconductors*, 1990, 11: 647 [李树深, 焦善庆. 垂直磁场中 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱内类氢杂质束缚能的计算. *半导体学报*, 1990, 11: 647]
- [5] Li Shushen. Binding energy calculation of hydrogenic impurities in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum well in vertical electric field. *Chinese Journal of Semiconductors*, 1991, 12: 715 [李树深. 垂直电场中 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱内类氢杂质束缚能的计算. *半导体学报*, 1991, 12: 715]
- [6] Li Shushen, Kong Xiaojun. Hydrogenic impurities in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs superlattices in an axial magnetic field. *J Phys: Condens Matter*, 1992, 4: 4815
- [7] Li Shushen, Yuan Wei, Liu Jianjun, et al. Calculation of binding energy and effect of image potential on binding energy of hydrogenic impurity near GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs heterojunction. *Chinese Journal of Semiconductors*, 1994, 15: 223 [李树深, 袁伟, 刘建军, 等. GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 异质结附近类氢杂质束缚能极受像势的影响. *半导体学报*, 1994, 15: 223]
- [8] Branis S V, Li Gang, Bajaj K K. Hydrogenic impurity in quantum wires in the presence of a magnetic field. *Phys Rev B*, 1993, 47(3): 1346
- [9] Montes A, Duque C A, et al. Electric field effects on the states of a donor impurity in rectangular cross-section vacuum/GaAs/vacuum quantum-well wires. *J Appl Phys*, 1998, 84(3): 1421
- [10] Latge A, Porras-Montenegro N, et al. Infrared transitions between hydrogenic states in cylindrical GaAs-(Ga, Al)As quantum-well wires. *Phys Rev B*, 1992, 45(16): 9420
- [11] Villamil P. Infrared transitions between hydrogenic states in cylindrical GaAs quantum-well wires under applied magnetic fields. *Phys Rev B*, 1999, 59(3): 1605
- [12] Rossi F, Goldoni G, Molinari E. Shape-independent scaling of exciton confinement in realistic quantum wires. *Phys Rev Lett*, 1997, 78(18): 3527
- [13] Zhang Yong, Mascarenhas A. Scaling of exciton energy and

virial theorem in semiconductor quantum wells and wires·
Phys Rev B, 1999, 59(3) :2040

249]

[15] Bastard G, Mendez E E , Chang L L, et al· Exciton binding energy in quantum wells· Phys Rev B, 1982, 26:1974

[14] Zeng Jinyan· Quantum mechanics(I)· Beijing: Science Press, 2001: 249 [曾谨言· 量子力学(I)· 北京: 科学出版社, 2001:

Scaling of Hydrogenic Impurity Binding Energy and Virial Theorem in Semiconductor Quantum Wells and Wires^{*}

Liu Jianjun^{1,2}, Su Hui¹ and Yang Guochen²

(¹ College of Physics, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050016, China)

(² Institute of Physics, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

Abstract: The scaling rule for hydrogenic impurity binding energy and the Virial theorem value (potential- to kinetic-energy) in quantum wells and wires of rectangular cross-section with three different section ratios are studied through the variational method. The results reveal that (1) A parameter (impurity effective Bohr radius a_{im}) that the impurity binding energy strongly depend on does exist; (2) The Virial theorem value is nonconstant but approaches $\frac{1}{2}$ from above when the wire width is very small or large and the Virial theorem value versus a_{im} does not increase monotonically due to the consideration of the correlation effect between the confined and non-confined directions.

Key words: scaling rule; Virial theorem; quantum well; quantum wire; impurity

PACC: 7865; 7320D; 7115p

Article ID: 0253-4177(2002)09-0925-05

* Project supported by Natural Science Foundation of Hebei Province (Grant No. 199181) and Natural Science Foundation of Hebei Educational Committee(Grant No. 200104)

Liu Jianjun male, was born in 1962, professor, PhD candidate. He is engaged in research on semiconductor superlattice physics and functional materials.

Su Hui female, was born in 1977, master. His major is semiconductor superlattice physics.

Yang Guochen male, was born in 1935, professor. He is now engaged in the research on phase transition and functional materials.

Received 18 December 2001, revised manuscript received 24 January 2002

©2002 The Chinese Institute of Electronics