

在 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子阱结构中的施主束缚能

刘 振 鹏 李 天 克

(辽宁大学物理系)

1984年4月11日收到

对由夹在两个半无限 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 块中的单 GaAs 层中的量子阱中浅施主基态束缚能做了变分计算。施主束缚能是作为 GaAs 层厚度和杂质位置的函数来计算的。研究了两种成分 $x = 0.1$ 和 $x = 0.4$ 。计算是在真实导带差额所决定的有限势垒情形下进行的。

计算结果与前人结果作了比较。结果表明,对杂质处于阱中心和 $x = 0.4$ 的情形,当阱厚 $L < 50 \text{ \AA}$ 时,束缚能的修正是显著的。例如峰值修正超过 15%。此外,还研究了由于 GaAs 和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 具有不同有效质量而对基态束缚能的影响。

一、引 言

近年来,半导体超晶格中的电子态已成为一个广泛的实验和理论研究课题^[1]。其中 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 系统是目前最简单和研究得最多的半导体超晶格。其原因是 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的禁带宽度随铝浓度的增加而增大,并可显著地超过 GaAs 的禁带宽度,于是在界面处能带边缘因发生突变而形成势垒,其中导带突变约占能隙差的 85%^[2],因此在 GaAs 层中的电子将受到邻近 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 层所形成势垒的约束。浅杂质态的行为对体材料的性质起极重要的作用,对超晶格中的浅杂质电子态的研究也已日益受到重视。前不久, G. Bastard^[3] 首先研究了与 GaAs-GaAlAs 系统相联系的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。其后 Mailhot, Chang, McGill^[4] (MCM) 以及 Greene 和 Bajaj^[5] (GB) 独立地利用真实的有限高势垒模型计算了类氢杂质态的束缚能,前者还考虑到两种材料由于不同的电子有效质量和介电常数的影响。最近, Tanaka 等人^[6] 考虑了不等高势垒的情形。

将 Bastard 的无限势垒模型的结果与已有的有限势垒结果比较发现,对于 $x = 0.4$ 的情形,当阱宽 $L \geq 50 \text{ \AA}$ 时,两者结果较相近。因此一般认为,对于浅施主和激子束缚能的计算,阱宽以 $50 \text{ \AA}$ 左右为无限势垒模型可用的下限^[7]。但 Miller 等人^[8] 曾利用无限势垒模型和近乎二维激子的变分波函数计算了 $1s$ 和 $2s$ 激子能级差 $E_{1s} - E_{2s}$, 结果与他们的实验数据符合得很好,而他们的阱宽下限接近 $30 \text{ \AA}$, Al 浓度是 0.37。考虑到轻、重空穴激子的有效玻尔半径(分别约 $130 \text{ \AA}$ 及 $160 \text{ \AA}$) 均显著大于施主杂质有效玻尔半径(约 $103 \text{ \AA}$)。因此我们觉得,对于激子束缚能的计算来说,无限势垒模型的可用下限似乎小于目

前认为的阱宽 $50 \text{ \AA}$ 。本文在此想法基础上重算了有限势垒模型的施主基态束缚能, 结果表明: 在窄阱区中, 我们的结果比前人的结果有较大的修正, 峰值的修正超过了 15%, 因而在较大范围内接近无限势垒模型的结果, 与上述猜想相一致。我们所用的计算方法是把由本文作者之一不久前所发展的变分法^[9,10]推广到有限量子阱的情形, 此法基于利用变分原理将原来的三维薛定谔方程一维化, 与 Hartree-Fock 利用变分原理将多粒子薛定谔方程单粒子化的方法很相似。本文第二节讨论计算方法, 导出相应的一维薛定谔方程及求解方法。第三节给出数字计算结果及讨论。最后在附录中, 我们证明了一个定理, 以保证我们的基态能是精确解的上限(对于束缚能来说是下限)。

二、计算方法

由于对于体 GaAs 和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 材料当 $x \leq 0.45$ 时, 能隙在 Γ 点处是直接的^[2], 因此单能谷有效质量近似作为处理浅施主杂质态来说是很好的近似^[11]。现考虑一施主原子在厚度为 $L = 2a$ 的量子阱中, 设势垒高度为 V_0 , 如果能量用 GaAs 的有效里德伯 $R_1^* = m_1^* c^4 / 2 \hbar^2 e_1^2$ 为单位, 长度用 GaAs 的有效玻尔半径 $a_1^* = \hbar^2 e_1 / m_1^* c^2$ 为单位, 则相应的有效质量哈密顿量为:

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{r}, \quad |z| < a \quad (1a)$$

$$H = -\alpha \nabla^2 - \beta \frac{2}{r} + V_0, \quad |z| > a \quad (1b)$$

这里

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

$$\alpha = \frac{m_1^*}{m_2^*}, \quad \beta = \frac{e_1}{e_2}.$$

其中 m_1^* , e_1 和 m_2^* , e_2 分别为体 GaAs 及体 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的有效质量和介电常数。坐标原点选在势阱中心, z_0 是杂质中心沿垂直于层平面方向 (z 方向) 的坐标。由于两种材料的介电常数相近以及便于和前人工作比较起见, 我们忽略了镜像力的影响。于是相应的薛定谔方程为

$$H\psi = E\psi. \quad (1c)$$

其中波函数满足如下的边界条件^[12]

$$\psi_- = \psi_+ \quad (2a)$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_- = \alpha \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_+. \quad (2b)$$

这里 $\pm$ 表示 $|z| \rightarrow a + 0_{\pm}$, 条件 (2b) 保证了穿过界面的几率流密度的连续性。如果我们用如下的边界条件代替 (2b):

$$\int_{|x|=a} \psi^* \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_- dx dy = \alpha \int_{|x|=a} \psi^* \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_+ dx dy, \quad (2c)$$

也就是说如果我们用流过界面的总几率流的连续性来代替几率流密度的连续性, 则可以

证明(见附录),在满足方程(1)及边界条件(2a)和(2c)的 ϕ 解空间中,存在一个 ϕ ,它满足边界条件(2b),且对应的基态能量本征值最小。因此用边界条件(2c)代替(2b)所得到的解,其基态能量本征值将是精确值的上限。

现在令 $\phi = r\Phi$ 代入(1)中再利用文献[9]的方法,则方程(1)可写成

$$\nabla \cdot (|\Phi|^2 \nabla r) - E' |\Phi|^2 r = -E |\Phi|^2 r, \quad |z| < a \quad (3a)$$

$$\alpha \nabla \cdot (|\Phi|^2 \nabla r) - \left[(\alpha - \beta) \frac{2}{r} + V_0 + \alpha E' \right] |\Phi|^2 r = -E |\Phi|^2 r, \quad |z| > a \quad (3b)$$

其中 Φ 和 E' 分别为体 GaAs 的基态波函数和能级。上式乘 χ ,再对相应的区域积分后相加得

$$E = \frac{I_V + I_s}{\int |\Phi|^2 \chi^2 d\tau}, \quad (4a)$$

$$\begin{aligned} I_V = & \int_{|z| < a} \{ (\nabla \chi)^2 |\Phi|^2 + E' |\Phi|^2 \chi^2 \} d\tau \\ & + \int_{|z| > a} \left\{ \alpha (\nabla \chi)^2 |\Phi|^2 + \left[(\alpha - \beta) \frac{2}{r} + V_0 + \alpha E' \right] |\Phi|^2 \chi^2 \right\} d\tau, \end{aligned} \quad (4b)$$

$$I_s = - \int_{|z|=a} \chi |\Phi|^2 \frac{\partial \chi}{\partial n} \Big|_- dx dy - \alpha \int_{|z|=a} \chi |\Phi|^2 \frac{\partial \chi}{\partial n'} \Big|_+ dx dy. \quad (4c)$$

这里 $\frac{\partial}{\partial n}$ 和 $\frac{\partial}{\partial n'}$ 分别表示在区域 $|z| < a$ 和 $|z| > a$ 中在界面 $|z| = a$ 处的外法向微商。因而

$$\frac{\partial}{\partial n} = - \frac{\partial}{\partial n'} = \pm \frac{\partial}{\partial z}. \quad (5)$$

这里的 $\pm$ 号对应于 $z = \pm a$ 。注意到边界条件(2a)和(2c),以及(5),则(4c)可写成

$$I_s = (1 - \alpha) \int_{|z|=a} \chi^2 \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial n} dx dy. \quad (4c)'$$

选择试探波函数的形式为 $\chi = e^{\lambda z} Q(z)$,其中 λ 为变分参量,代入(4a),(4b)和(4c)',将 E 看成是 Q 的泛函,对 Q 求变分并令 $\delta E = 0$,则标准的变分手续可得到 Q 所满足的欧拉方程为

$$- \frac{d}{dz} \left(f \frac{dQ}{dz} \right) + (\lambda^2 + E' - E) f Q - \lambda \left[f_1 + (z - z_0) \frac{df_1}{dz} \right] Q = 0, \quad |z| < a \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} & - \alpha \frac{d}{dz} \left(f \frac{dQ}{dz} \right) + (\alpha \lambda^2 + \alpha E' - E + V_0) f Q \\ & - \lambda \alpha \left[f_1 + (z - z_0) \frac{df_1}{dz} \right] Q + 2(\alpha - \beta) f_1 Q = 0, \quad |z| > a \end{aligned} \quad (6b)$$

及边界条件

$$Q_- = Q_+, \quad (7a)$$

$$\int_{|z|=a} e^{\lambda z} \Phi^* \frac{\partial (\Phi e^{\lambda z} Q)}{\partial n} \Big|_- dx dy + \int_{|z|=a} \alpha e^{\lambda z} \Phi^* \frac{\partial (\Phi e^{\lambda z} Q)}{\partial n'} \Big|_+ dx dy = 0. \quad (7b)$$

其中 f 和 f_1 由文献 [9] 中 (2.11) 和 (2.12) 定义, 不难看出条件 (7b) 即 (2c). 如果令 $Q = f^{-1/2}W$ 并注意到 $E' = -1$, 则 (6) 可写成

$$H_{eq}W = EW, \quad (8a)$$

其中等效哈密顿量定义为

$$H_{eq} = -\frac{d^2}{dz^2} - \left\{ \frac{1+\lambda}{t + \frac{1}{2(1-\lambda)}} + \frac{1}{4 \left[t + \frac{1}{2(1-\lambda)} \right]^2} \right\}, \quad |z| < a \quad (8b)$$

$$H_{eq} = -\alpha \frac{d^2}{dz^2} + V_0 - \left\{ \frac{\alpha(\lambda-1) + 2\beta}{t + \frac{1}{2(1-\lambda)}} + \frac{\alpha}{4 \left[t + \frac{1}{2(1-\lambda)} \right]^2} \right\}, \quad |z| > a \quad (8c)$$

其中 $t = |z - z_0|$, 及边界条件(见附录)

$$W_- = W_+, \quad (9a)$$

$$\frac{dW}{dz} \Big|_- = \alpha \frac{dW}{dz} \Big|_+. \quad (9b)$$

方程 (8) 在以下几种极限情形下具有与精确解一致的解析解.

(a) 当 $a \rightarrow \infty$ 时, 即体 GaAs 情形, 相应于 H_{eq} 中的 $\lambda = 0$, 则存在一偶宇称基态解

$$W = \sqrt{t + 0.5} e^{-t}. \quad (10)$$

其本征值为 $E = -1$, 对应于 $1s$ 态. 当 H_{eq} 中的 $\lambda = 1/2$ 时, 存在一奇宇称第一激发态解

$$W = (z - z_0) \sqrt{t + 1} e^{-t/2}. \quad (11)$$

其对应的本征值 $E = -1/4$, 对应于 $2P_0$ 态.

(b) 当 $a \rightarrow 0$, V_0 保持有限的情形, 则当 H_{eq} 中的 $\lambda = 1 - \beta/\alpha$ 时, 存在一偶宇称基态解

$$W = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha} t + 0.5} e^{-\beta t/\alpha}. \quad (10')$$

其本征值为 $E = V_0 - \beta^2/\alpha$, 对应于体 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的 $1s$ 态. 当 H_{eq} 中的 $\lambda = 1 - \beta/2\alpha$ 时, 存在一奇宇称第一激发态解

$$W = (z - z_0) \sqrt{\frac{\beta}{\alpha} t + 1} e^{-\beta t/2\alpha}. \quad (11')$$

其本征值为 $E = V_0 - \beta^2/4\alpha$, 对应于体 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的 $2P_0$ 态, 解 (10)', (11)' 可从 (10), (11) 进行标度变换 $t \rightarrow \beta t/\alpha$ 得到, 相应能量的标度变换为 $E \rightarrow E\beta^2/\alpha + V_0$.

(c) 当 $V_0 \rightarrow \infty$ 时的情形: A. $a \rightarrow \infty$, 当 $z_0 = -a$ 时即杂质在界面处, 这问题化为单表面情形, 只要保留 (11) 式中 $z - z_0 > 0$ 的部分, 即对应于 Levine 的基态, 本征值为 $-1/4$. B. 当 $a \rightarrow 0$ 时, 方程具有解 $W = \sin\left(\frac{\pi}{L} z\right)$, 相应的 $\lambda = -1$, 则束缚能 $E_B = 4$ 对应于二维氢原子的基态本征值.

因此, 方程 (8) 在极限条件下具有与全部已知精确解相一致的解析解.

对于 a , V_0 和 z_0 为任意值的情形, 可求方程 (8) 具有边界条件 (9) 的数字解. 由于

方程(8)无奇异性,因此数字求解是很方便的. 变分参数必须调整,使所求得能量本征值为极小即为相应三维问题的基态能.

三、计算结果和讨论

为了便于比较,我们采用文献[1]和[4]中的材料参数

$$\begin{aligned} m_1^* &= 0.067m, \quad m_2^* = (0.067 + 0.083x)m_0, \\ \epsilon_1 &= 13.1\epsilon_0, \quad \epsilon_2 = [13.1(1-x) + 10.1x]\epsilon_0, \\ V &= 1.06x, \quad (\text{eV}) \end{aligned} \quad (12)$$

这里 m_0 和 ϵ_0 分别为自由电子质量和真空介电常数.

为了计算束缚能 E_B , 首先必须求得当不存在杂质时, 电子在量子阱中的基态能 E_0 , 这很容易由以下的正切方程中求得

$$\tan(\sqrt{E_0}a) = \sqrt{\alpha(V_0 - E_0)/E_0}. \quad (13)$$

于是基态束缚能 E_B 由 E_0 和方程(8)关于 λ 的最小能量本征值之差确定.

图1表示相对于最低导子带测量的施主基态能谱($-E_B$); 对于杂质原子处于势阱中心以及铝浓度 $x = 0.1$ 和 0.4 的情形. 其中虚线表示 MCM 的结果^[4]. 由图看出, 在全部范围内, 我们的结果均优于 MCM 的结果, 特别是在窄阱情形 ($L \lesssim 20$ GaAs 单层或约 $50 \text{ \AA}$), 修正显著的, 最大值的修正超过 15% , 与此同时 $x = 0.4$ 时峰值所对应的阱宽(约 3 个 GaAs 单层)小于 MCM 的结果(约 5 个 GaAs 单层), 发生这种偏离的原因可能是这

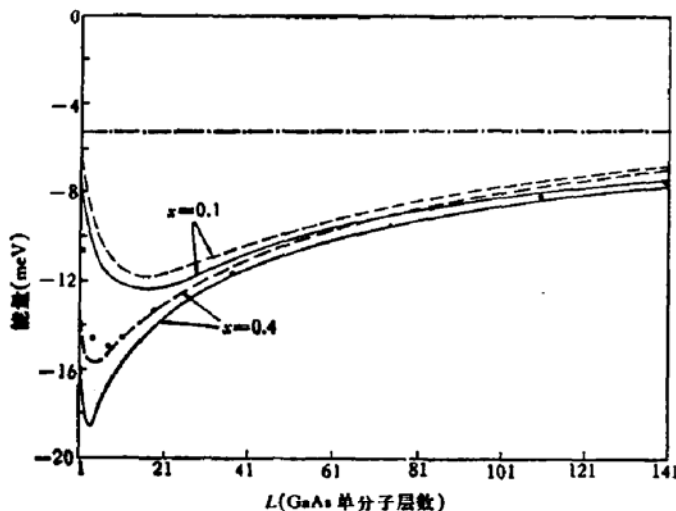


图1 相对于第一导子带测量的位于阱中心杂质的基态能与 GaAs 层厚的关系. Al 浓度为 $x = 0.1$ 和 0.4 . 点代表忽略两种材料电子有效质量差别所得的结果. 虚线表示 MCM 的结果. 点划线表示体 GaAs 束缚能. 1 个 GaAs 单层厚度为 $2.83 \text{ \AA}$.

样, 在 MCM 的计算中^[4], 所采用的变分波函数是由一维有限势阱的哈密顿的基态解乘 19 个二维高斯轨道的线性组合而组成的. 很明显, 这一变分波函数在 $a \rightarrow 0$ 和 $a \rightarrow \infty$ 时都不能重现体 GaAlAs 和体 GaAs 极限下的精确解. 特别是当 a 很小的情形, 由于界面影响强烈而使这种不精确性大大增加了, 这就使得 MCM 的计算在窄阱区只有定性的正确性. 在 [1] 中 MCM 采用了定义在椭球坐标系中的三维高斯轨道集, 但并无明显改进. 后者虽能更体现体特征, 但仍不能重现上述精确解. 同样的情况也发生在 GB 的计算中, 他们用了大量的变分参数, 使得在 $a \rightarrow \infty$ 时与精确解的误差小于 0.1% , 但在窄阱区时仍存在上述问题, 因而与 MCM 结果相近. 在图 1 中, 我们用点表示出当忽略两种材料电子有效质量差别所得的结果 ($x = 0.4$). 这一近似曾被很多人采用^{[5], [6], [33]}. 由图可见, 对窄

阱区这种效应的影响是强烈的, 当 $L \geq a_1^*$ (约 36.5 GaAs 单层) 时忽略这种差别是很好的近似。

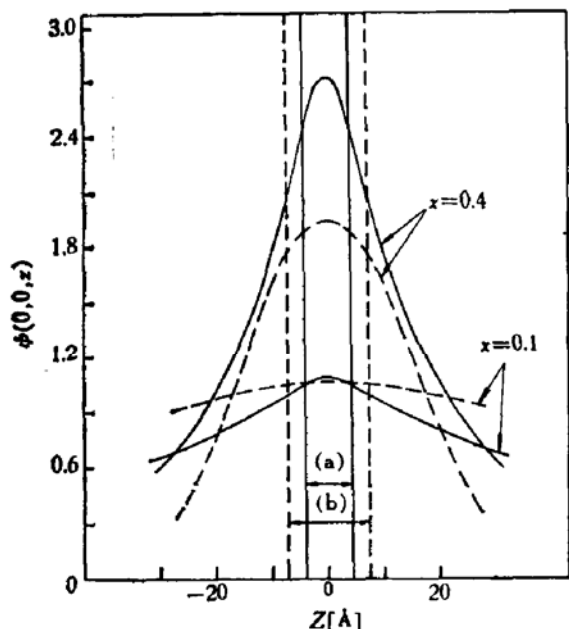


图 2 对于杂质在阱中心处最大束缚能相应的波函数 $\phi(0, 0, z)$ 沿垂直于层平面方向上的位置的依赖关系, 虚线是 MCM 的结果, 上面的曲线表示 $x = 0.4$, 下面的表示 $x = 0.1$, 相应的阱宽为 a 和 b 对应于 3 和 5 个 GaAs 单层。

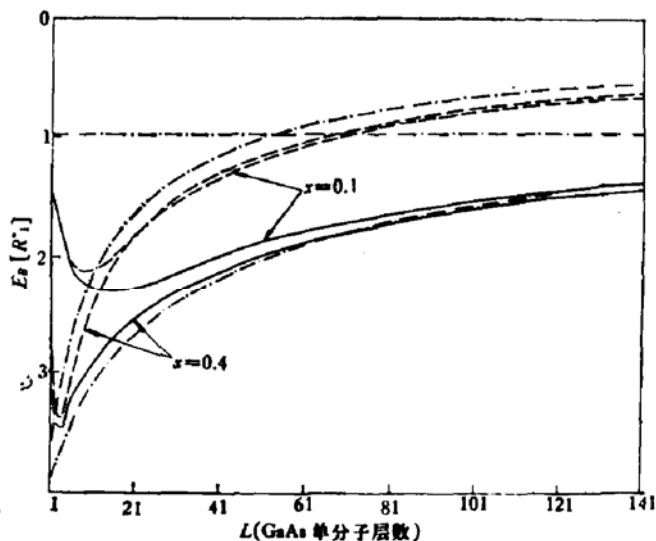


图 3 施主基态束缚能与 GaAs 层厚的关系, 实线表示杂质位于阱中心情形, 虚线表示位于边缘时的情形, 点划线为 Bastard 的结果。上面的曲线组为边缘情形, 下面的表示在中心的情形, 水平点划线为体 GaAs 值。

图 2 表示杂质位于阱中心时, 束缚能最大值所对应的归一化波函数在通过 z 轴的值 $\phi(0, 0, z)$ 与 z 坐标的关系。由图可见, 与 MCM 的结果^[1]相比, 我们的波函数在杂质中心附近有较高的峰值, 因而有利于降低势能, 而较长的指数型拖尾符合库仑场中波函数的渐近行为。MCM 的高斯型拖尾则在较大范围内下降速度较快, 不利于有效地降低平均动能。

图 3 表示 $x = 0.1$ 和 0.4 且杂质位于势阱中心和边缘的束缚能 E_D 与 GaAs 层厚的关系, 其中点划线表示 Bastard 的结果^[2], 对于杂质位于中心的情形, 直到非常窄的阱厚 (约 4 个 GaAs 单层) 两者相差小于 6%, 而对于位于边缘的情形差别不大于 14%, 但两种情况符号相反, 因而在激子束缚能的计算中, 由于空穴在阱中的分布几率有一定的铺伸, 而使两者在一定程度上相互抵消, 从而导致两种模型的结果更加趋于一致。这有助于说明 Miller 等人利用无限势垒模型计算激子束缚能在窄阱区能获得成功的原因。图 3 中当 $L > 60$ GaAs 单层时, 对中心杂质情形, Bastard 结果小于 $x = 0.4$ 的有限势垒的结果是由于前者的计算不够准确所致^[14]。

图 4 表示对 GaAs 层厚为 $L = 0.5, 1$ 和 $3a_1^*$ 三种情形下, 施主基态束缚能与杂质位置的关系。其中点划线为 Bastard 的结果。由图看出, 如所预料, 对于消除能级对杂质位置的简并来说, 有限势垒不如无限势垒模型那样有效, 特别是对于窄阱情形对吸收谱线宽的影响更明显。例如对阱宽为 0.25 的情形从 $1s \rightarrow 2p_{x,y}$ 的吸收线宽可算得约为 2 meV 大大地小于 Bastard 等人的约 4.8 meV 的结果^[15]。

图 5 表示对于固定的 L 当束缚能取极大时的参量 $(1-\lambda)^{-1}$ 与 GaAs 层厚的关系。此量与文献 [6] 中的 $\lambda_{\min}$ 相同,其物理意义如 Tanaka 等人强调的那样,是电子几率密度铺伸范围的量度。与束缚能相似,对于中心杂质情形,随 a 从零增加, $(1-\lambda)^{-1}$ 从理论值 $\alpha a_1^*/\beta$ 先减小,经过极值点后,再逐渐增大而趋于 $1a_1^*$ 。而对无限势垒模型则是从 0.5 连续增至 $1a_1^*$ 。图中 Bastard 的结果在 $L \approx 3a_1^*$ 附近 $(1-\lambda)^{-1} > 1a_1^*$ 是该理论尚不够精确所致^[14]。

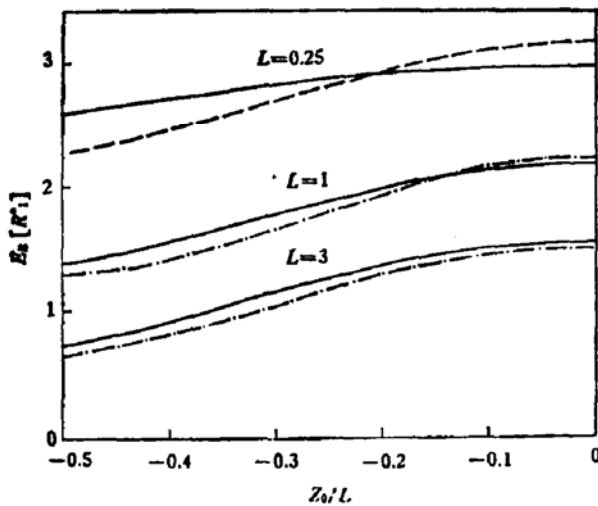


图 4 对于几个典型厚度的 GaAs 层中施主基态束缚能与杂质位置的关系
虚线对应于 Bastard 的结果

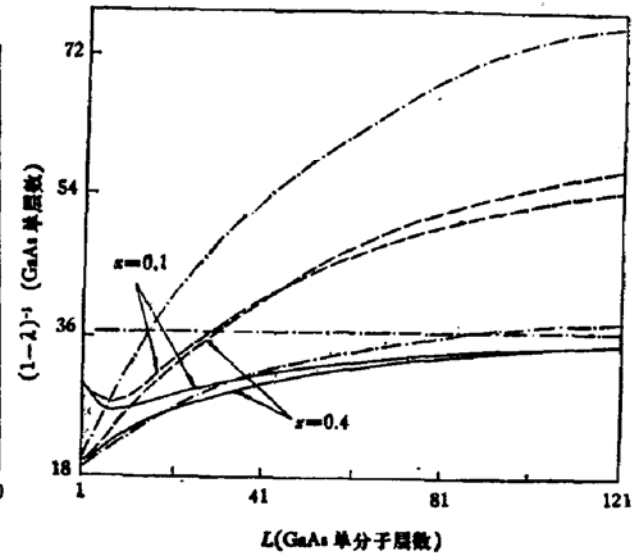


图 5 参量 $(1-\lambda)^{-1}$ 与 GaAs 层厚的关系。
实线对应于杂质在阱中心;虚线对应于杂质在阱边缘;点划线表示 Bastard 的结果,上面的曲线组表示杂质在边缘的情况;下面的表示杂质在中心的情况,水平点划线表示体 GaAs 值。

总的说来,势阱限制作用使自由电子和束缚电子的能级都上升,不过后者不如前者上升得快,从而使束缚能增加,这是由于当阱宽减小时电子的局域性增强从而增加了库仑吸引势,但当阱宽小到一定数值时,由于波函数穿入势垒的部分越来越多致使平均势能增加,从而使束缚能的增加变慢甚至减小因而出现在极值点。对于无限势垒模型,由于限制作用强,致使两者上升得都很快,但其差值即束缚能却在很大范围内保持与有限势垒相近的结果。当然对于 L 很小,且 V_0 很大的情形,第一导子带的能量 E_0 变得十分大,从而使 k 空间中子带等能面远离 Γ 点,这时非抛物性将对束缚能产生贡献,且使有效质量依赖于 L ,这种效应对于受主态更显著,因为有轻重空穴带的杂化^[16]。不过这些复杂性的影响相对来说是次要的。

附 录

定理: 设 ψ 在区间 $|x| < a$ 及 $|x| > a$ 中满足方程

$$(-\nabla^2 + V)\psi = E\psi \quad |x| < a \quad (\text{A.1a})$$

$$(-\alpha\nabla^2 + V')\psi = E\psi \quad |x| > a \quad (\text{A.1b})$$

且在 $|x| = a$ 处满足边界条件

$$\psi_- = \psi_+ \quad (\text{A.2a})$$

$$\int_{|x|=a} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_- dx dy = \alpha \int_{|x|=a} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_+ dx dy \quad (\text{A.2b})$$

其中 $\mp$ 表示 $|x| \rightarrow a \pm 0$, 如果当 ψ 进一步满足条件

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_- = \alpha \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_+ \quad (\text{A.3})$$

时, 则相应的基态能量本征值最小。证: 将 (A.1a) 和 (A.1b) 左乘 ψ^* 后, 在相应区间内积分并相加, 再利用高斯定理后得:

$$E = \frac{\int_{|x|<a} (|\nabla \psi|^2 + V|\psi|^2) d\tau + \int_{|x|>a} (\alpha|\nabla \psi|^2 + V'|\psi|^2) d\tau + I_1}{\int |\psi|^2 d\tau} \quad (\text{A.4})$$

其中

$$I_1 = \int_{|x|=a} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial n} \right)_- dx dy + \alpha \int_{|x|=a} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial n} \right)_+ dx dy$$

设 $\varphi = \psi + \varepsilon \eta$ 为满足相同条件的比较函数集, ε 为小参量, η 不失一般性可取为实函数, 则由 (A.2a) 可知 $\eta_- = \eta_+$. 因此当 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时, 将 φ 代入 (A.4) 中, 注意到 $I_1 = 0$ 及由 $dE/d\varepsilon = 0$ 得

$$I_V + I_1 + c.c = 0 \quad (\text{A.5})$$

其中

$$I_V = \int_{|x|<a} [(-\nabla^2 + V - E)\psi] \eta d\tau + \int_{|x|>a} [(-\alpha \nabla^2 + V' - E)\psi] \eta d\tau \quad (\text{A.6a})$$

$$I_1 = \int_{|x|=a} \left(\frac{\partial \psi}{\partial n} \Big|_- + \alpha \frac{\partial \psi}{\partial n} \Big|_+ \right) \eta dx dy \quad (\text{A.6b})$$

$c.c$ 是上两式的复数共轭, 如果令 $\varphi = \psi + i\varepsilon \eta$, 则 $dE/d\varepsilon = 0$, 导出

$$I_V + I_1 - c.c = 0. \quad (\text{A.5})'$$

由 (A.5), (A.5)' 得 $I_V + I_1 = 0$, 及 η 函数的任意性和在 $|x| = a$ 处的连续性可知, 使泛函 E 取极值的 ψ 必须满足方程 (A.1) 及条件 (A.3), 自然也满足 (A.2). 因此对基态解来说, 满足条件 (A.2a) 和 (A.3) 的解是满足 (A.2) 的解空间中能量最小的.

另外在此给出边界条件 (9b) 的推导

$$\begin{aligned} (7b) &= \left(\frac{\partial Q}{\partial n} \Big|_- + \alpha \frac{\partial Q}{\partial n} \Big|_+ \right) \int_{|x|=a} e^{i\lambda r} |\Phi|^2 dx dy \\ &\quad + (1 - \alpha) Q \int_{|x|=a} e^{i\lambda r} \Phi^* \frac{\partial (e^{i\lambda r} \Phi)}{\partial n} dx dy \\ &= \left(\frac{\partial Q}{\partial n} \Big|_- + \alpha \frac{\partial Q}{\partial n} \Big|_+ \right) f + \frac{1}{2} (1 - \alpha) Q \frac{\partial}{\partial n} \int_{|x|=a} e^{i\lambda r} |\Phi|^2 dx dy \\ &= f^{1/2} \left(\frac{\partial W}{\partial n} \Big|_- + \alpha \frac{\partial W}{\partial n} \Big|_+ \right) + (1 - \alpha) W f \frac{\partial f^{-1/2}}{\partial n} \\ &\quad + \frac{1}{2} (1 - \alpha) W f^{1/2} \frac{\partial f}{\partial n} = f^{1/2} \left(\frac{\partial W}{\partial n} \Big|_- + \alpha \frac{\partial W}{\partial n} \Big|_+ \right) = 0 \end{aligned}$$

由于 $f^{1/2} \neq 0$, 故得到边界条件 (9.b). 以上推导用到了 f 和 W 的定义, 性质 (5) 及 Φ 是实函数以及在 $|x| = a$ 处的连续性.

参 考 文 献

- [1] C. Mailhot, Y. C. Chang and T. C. McGill, *Phys. Rev. B* 26, 4449 (1982), 及其所引文献.
- [2] H. C. Casey and M. B. Panish, *Heterostructure Lasers*, Part A. P. 192, Academic press. New York

- (1978).
- [3] G. Bastard, *Phys. Rev.*, B24, 4714 (1981).
 - [4] C. Mailhot, Y. C. Chang and T. C. McGill, *Surf. Sci.*, 113, 161 (1982).
 - [5] R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Solid State Commun.*, 45, 825 (1983).
 - [6] K. Tanaka, M. Nagaoka and T. Yamabe, *Phys. Rev.*, B28, 7068 (1983).
 - [7] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, *Phys. Rev.*, B26, 1974 (1982).
 - [8] R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. T. Tsang and A. C. Gossard, *Phys. Rev.*, B24, 1134 (1981).
 - [9] 刘振鹏, 半导体学报, 4, 313(1983).
 - [10] Zhenpeng Liu and D. L. Lin, *Phys. Rev.* B28, 4413 (1983).
 - [11] G. E. Stilman, C. M. Larsen, C. M. Wolfe and C. R. Brandt, *Solid State Commun.*, 9, 51 (1967).
 - [12] T. Ando and S. Mori, *Surf. Sci.*, 113, 124 (1982).
 - [13] S. Chaudhuri, *Phys. Rev.*, B28, 4480 (1983).
 - [14] 刘振鹏, 半导体学报(待发表).
 - [15] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, *Solid State Commun.*, 45, 367 (1983).
 - [16] C. C. Негорезов, *ФТТ*, 12, 2269 (1970).

Binding Energy of Donors in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs Quantum Well Structures

Liu Zhenpeng and Li Tianke
(Department of Physics, Liaoning University)

Abstract

Binding energies of the ground state are calculated using a variational approach for shallow donors in quantum well structures consisting of a single slab of GaAs sandwiched between two semi-infinite slabs of Ga_{1-x}Al_xAs. The binding energy of donors is calculated as a function of GaAs layer thickness and of the impurity position. Two alloy compositions $x=0.1$ and 0.4 are studied. The calculations are carried out in the case of finite potential barriers determined by realistic conduction band offsets.

The results of the present calculation are compared with those of some previous calculations. It is found that the impurity atom is located at the center of the quantum well (on-center impurity) and the composition $x=0.4$. When the well thickness $L \lesssim 50 \text{ \AA}$, the modification is considerable. For example, the peak value correction exceeds 15%. Furthermore the influence of the different effective masses of GaAs and Ga_{1-x}Al_xAs on the ground state binding energy is investigated.