

# 垂直电场中 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子阱内 类氢杂质束缚能计算

李 树 深

(河北师范大学物理系, 石家庄, 050016)

1990 年 11 月 12 日收到, 1991 年 3 月 22 日修改定稿

在有效质量近似下, 研究电场对  $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  量子阱子带和类氢杂质束缚能的影响。计算中考虑到了  $\text{GaAs}$  和  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  中的电子具有不同的有效质量和不同的介电常数。数值计算结果表明,  $\text{GaAs}$  和  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  中电子有效质量的差异将对电子子带产生较大影响; 在阱宽较小时(约  $10 \text{ \AA}$  左右), 垂直电场对量子阱内类氢杂质束缚能影响较大。

## 一、引 言

近年来, 许多作者<sup>[1-4]</sup>对电场下量子阱的子带作了研究, Matsuura 等人<sup>[1]</sup>用无限势垒模型计算了量子阱中电子和空穴各个子带, 显然他们选用的模型过于简单。Sanders 等人<sup>[2]</sup>采用有限势垒模型, 并考虑到轻重空穴混合对子带的影响, 变分计算了量子阱的子能带。夏建白和黄昆<sup>[3]</sup>对电场下量子阱的子能带和激子等问题作了进一步研究, 得到了令人满意的结果。文献 [4] 采用有限势垒模型, 并考虑到电场对阱内外电子和空穴所受势的影响, 选取合适的哈密顿微扰项, 计算了电场对量子阱子带和激子的影响, 得到了与实验符合得较好的数值计算结果, 但计算中没有计入  $\text{GaAs}$  和  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  中电子具有不同的有效质量的影响。

文 [5] 计算了无限深势阱中类氢杂质束缚能, 但由于变分波函数选取不佳, 导致受限杂质具有偏大的横向延伸。其后, Mailhait 等人<sup>[6,7]</sup>以及 Greene 等人<sup>[8]</sup>又独立地分别计算了有限深势阱内类氢杂质束缚能, 但他们所采用的变分波函数不能给出极限下的精确解。刘振鹏等人<sup>[9,10]</sup>用文献 [11] 发展的变分法成功地计算了无限深和有限深量子阱中的类氢杂质束缚能, 克服了文献 [5-8] 计算中的缺陷。文献 [12] 采用另外一种变分波函数描述量子阱中类氢杂质基态, 计算了类氢杂质基态波函数和结合能, 计算结果表明正确考虑窄量子阱与杂质势间的耦合作用是极为重要的。本文作者和合作者<sup>[13]</sup>曾用文 [11] 发展的变分法计算了磁场中  $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  量子阱内类氢杂质束缚能, 与实验结果较好相符, 改进了文 [14] 对类似问题的计算。

本文考虑到电子在  $\text{GaAs}$  和  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  中具有不同的有效质量和介电常数的情况下, 计算了  $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  量子阱中的子带和类氢杂质束缚能受电场的影响。本文第二第三部分分别给出电子子带和类氢杂质束缚能的理论计算, 第四、五部分给出数值计算结果和简要讨论。

## 二、电场下量子阱中电子子带

设电子(带电 $-e$ )处于 GaAs-Ga $_{1-x}$ Al $_x$ As 量子阱(方向沿  $z$ ) 中,沿  $z$  方向加一电场  $F$ , 则电子的哈密顿量为

$$H_z = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{d^2}{dz^2} + eFz, & |z| < \frac{L}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 + eFz, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (1)$$

其中,  $L$  和  $V_0$  分别为量子阱宽和高;  $m_1^*$  和  $m_2^*$  分别为电子在 GaAs 和 Ga $_{1-x}$ Al $_x$ As 中的有效质量.

薛定谔方程为

$$H_z \phi(z) = E_z \phi(z) \quad (2)$$

采用如下边界条件<sup>[15]</sup>

$$\begin{cases} \phi(z)|_- = \phi(z)|_+ \\ \left. \frac{1}{m_1^*} \frac{d\phi(z)}{dz} \right|_- = \left. \frac{1}{m_2^*} \frac{d\phi(z)}{dz} \right|_+ \end{cases} \quad (3)$$

式中 $\pm$ 号表示  $|z| \rightarrow \frac{L}{2} + 0_{\pm}$ .

我们取<sup>[4]</sup>

$$H_z = H_{z0} + H'_z \quad (4)$$

式中

$$H_{z0} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 - eFL/2, & z \leq -\frac{L}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{d^2}{dz^2} + eFz, & |z| < \frac{L}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 + eFL/2, & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (5)$$

$$H'_z = \begin{cases} eFz + eFL/2, & z \leq -\frac{L}{2} \\ 0, & |z| < \frac{L}{2} \\ eFz - eFL/2, & z \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (6)$$

$H'_z$  为微扰哈密顿量.

由级数解法可以得到  $H_{z0}$  对应的能级由下式决定

$$\begin{vmatrix} 1 & W_{12} & W_{13} & 0 \\ \alpha K_1 & W_{22} & W_{23} & 0 \\ 0 & W_{32} & W_{33} & 1 \\ 0 & W_{42} & W_{43} & -\alpha K_3 \end{vmatrix} = 0 \quad (7)$$

上式中各个  $W$  及  $K$  的表达式均与文[4]相同, 并且

$$\alpha = \frac{m_1^*}{m_2^*} \quad (8)$$

然后再计算  $H'$  所相应的微扰项, 即可得到电子的子带.

### 三、电场下量子阱中类氢杂质束缚能

设一类氢杂质位于 GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 量子阱(方向沿  $z$ )中, 沿  $z$  方向加一电场  $F$ , 则类氢杂质的哈密顿量可以写为

$$H = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla^2 + eFz - \frac{e^2}{\epsilon_1 r}, & |z| < \frac{L}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla^2 + eFz - \frac{e^2}{\epsilon_2 r} + V_0, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (9)$$

式中,  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  分别为 GaAs 和 Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 中电子的介电常数;

$$r = [\rho^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}$$

表示电子与类氢杂质中心的距离;  $z_0$  为杂质中心在  $z$  方向的坐标. 让  $z$  轴通过杂质中心,  $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$  表示  $xy$  面内电子与杂质中心的距离.

若能量和长度分别以 GaAs 的有效里德堡  $R_1^* \left( = \frac{m_1^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon_1^2} \right)$  和有效玻尔半径  $a_1^* \left( = \frac{\hbar^2 \epsilon_1}{m_1^* e^2} \right)$  为单位, 则式(9)给出的类氢杂质哈密顿量可以表示为

$$H = \begin{cases} -\nabla^2 + \gamma z - \frac{2}{r}, & |z| < \frac{L}{2} \\ -\alpha \nabla^2 + \gamma z - \beta \frac{2}{r} + V_0, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (10)$$

式中

$$\beta = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}; \quad \gamma = \frac{eFa_1^*}{R_1^*}. \quad (11)$$

薛定谔方程和相应的边界条件<sup>[15]</sup>为

$$H\psi = E\psi \quad (12)$$

$$\begin{cases} \psi|_- = \psi|_+ \\ \frac{\partial \psi}{\partial z}|_- = \alpha \frac{\partial \psi}{\partial z}|_+ \end{cases} \quad (13)$$

根据文献[11]发展的变分法, 引入试探波函数

$$\psi = e^{\lambda r} f_1^{-1/2} W(z) \Phi \quad (14)$$

式中各量的说明可参考文献[13].

采用文献[9,10]发展的一维化方法, 经过相当复杂的数学推算, 可以得到

$$H_{eff}W(z) = EW(z) \tag{15}$$

$$H_{eff} = \begin{cases} -\frac{d^2}{dz^2} + U + \gamma z, & |z| < \frac{L}{2} \\ -\alpha \frac{d^2}{dz^2} + \bar{U} + \gamma z, & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \tag{16}$$

边界条件为

$$\begin{cases} W|_- = W|_+ \\ \frac{dW}{dz}|_- = \alpha \frac{dW}{dz}|_+ \end{cases} \tag{17}$$

其中  $U$ 、 $\bar{U}$  及  $K$  的表达式与文献[10]相同。

对于基态和  $2p_{\pm}$  态可以得到  $H_{eff}$  的具体表达式,由(15)式可以求得数值解  $E$ 。

### 四、数值计算

取如下势垒和材料参数<sup>[4,6,7]</sup>

$$\begin{cases} V_0 = 0.60(1.155x + 0.37x^2)eV \\ m_1^* = 0.067m_0 \\ m_2^* = (0.067 + 0.083x)m_0 \\ \epsilon_1 = 13.1\epsilon_0 \\ \epsilon_2 = [13.1(1-x) + 10.1x]\epsilon_0 \end{cases} \tag{18}$$

式中,  $m_0$  和  $\epsilon_0$  分别是自由电子静止质量和真空介电常数。

计算中,取铝的浓度  $x = 0.3$ 。

类氢杂质的束缚能由下式给出

$$E_b = E_{s1} - E \tag{19}$$

其中  $E_{s1}$  为电场下量子阱中电子第一导子带值。

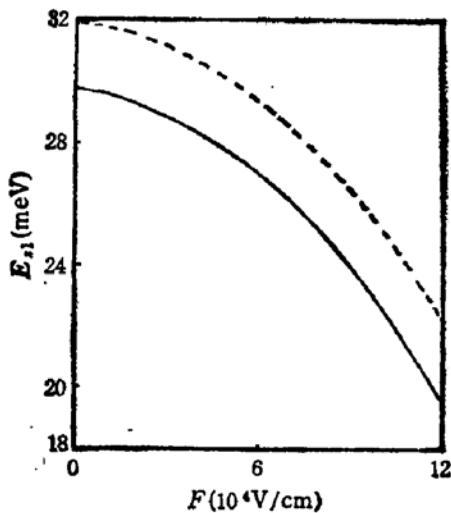


图1 电子第一导子带随电场的变化  
实线为本文结果,点划线为文献[4]结果

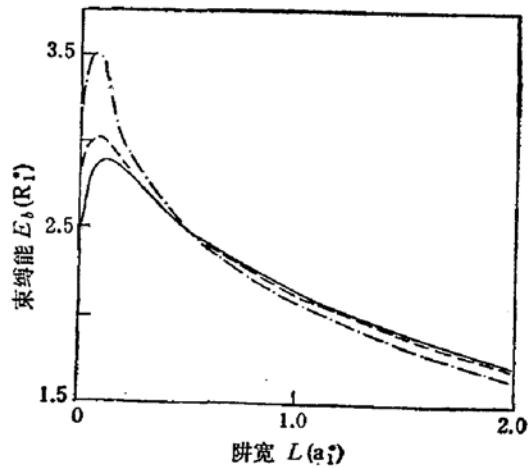


图2 基态束缚能随阱宽的变化  
实线、虚线、点划线分别对应于  $\gamma = 0.0, 5.0, 10.0$

图 1 给出了阱宽  $L$  为  $100 \text{ \AA}$  时, 电子第一导子带随电场强度的变化. 与文献[4]取  $m_1^* = m_2^* = 0.067 m_0$  相比, 本文结果比文献[4]要小  $2.2 \text{ meV}$  以上, 随着电场强度的加大, 二者的差别也随之加大. 例如, 在零电场时, 二者相差约  $2.2 \text{ meV}$ , 而电场加大到  $1.2 \times 10^5 \text{ V/cm}$  时, 二者相差达  $2.7 \text{ meV}$  以上. 对于轻、重空穴也有类似结果.

图 2 和图 3 分别给出了不同电场下量子阱中类氢杂质基态及  $2p_{\pm}$  态束缚能随阱宽的变化, 其中杂质位于阱中心. 电场对类氢杂质束缚能的明显影响集中在窄阱区. 阱宽约为  $0.1 a_1^*$  ( $10 \text{ \AA}$  左右) 时类氢杂质束缚能受电场影响最大. 例如对于  $2p_{\pm}$  态束缚能改变可达  $0.8 R_1^*$  ( $4.2 \text{ meV}$  左右) 以上. 出现这样的结果是可以理解的. 因为, 当阱宽较大时, 我们处理的问题与体 GaAs 情形接近, 这时电场可以看作微扰, 对类氢杂质束缚能影响不大; 当阱宽由大逐渐变小时, 量子阱对类氢杂质的束缚加大, 由于外加电场破坏了量子阱的对称性, 导致阱中类氢杂质量子化能量的降低大于电子第一导子带的降低, 总的结果使阱中类氢杂质束缚能加大; 当阱宽接近于零时, 波函数扩展到阱外的部分加大, 与体 Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 情形相似, 电场只对类氢杂质起微扰作用. 另外, 与磁场情形不同, 电场不解除  $2p_{\pm}$  态能量的简并性.

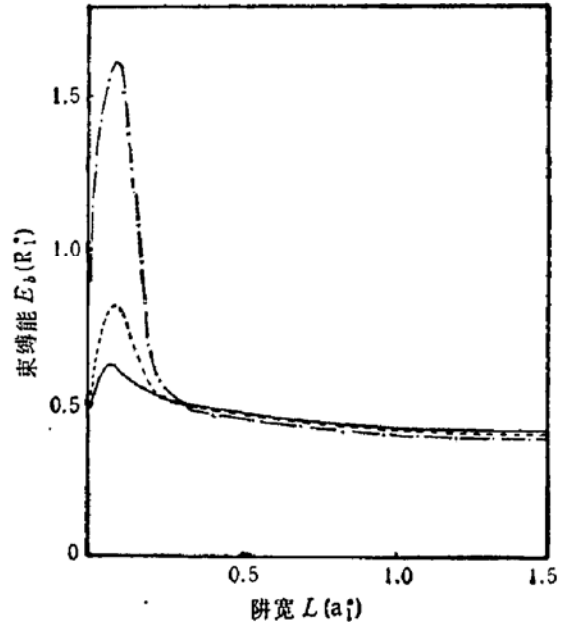


图 3  $2p_{\pm}$  态束缚能随阱宽的变化  
实线、虚线、点划线分别对应于  $\gamma = 0.0, 5.0, 10.0$

## 五、结 论

电场中量子阱内类氢杂质束缚能的计算还不多见, 这可能有两方面的原因, 一是由于问题本身具有一定复杂性, 用传统变分法处理起来有一定困难; 二是有人认为, 与体内类氢杂质相似, 电场只会对类氢杂质束缚能起微扰作用. 本文计算发现, 在阱宽较小时 (约  $10 \text{ \AA}$  左右), 垂直电场对量子阱内类氢杂质束缚能将产生较大影响. 另外, 本文对垂直电场下量子阱中的电子子带也作了较详细的计算, 所用的方法是现在一般认为比较好的级数解法, 结果表明 GaAs 和 Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 中电子有效质量的差异将对电子子带产生较大影响.

## 参 考 文 献

- [1] M. Matsuura and T. Kamizato, *Phys. Rev.*, **B33**, 8385 (1986).
- [2] G. D. Sanders and K. K. Bajaj, *Phys. Rev.*, **B35**, 2308 (1987).
- [3] 夏建白、黄昆, 物理学报, **37**, 1 (1988).
- [4] 朱嘉麟、唐道华、熊家炯、顾秉林, 物理学报, **38**, 385 (1989).  
Jia-Lin Zhu, Dao-Hua Tang and Jia-Jiong Xiong, *Phys. Rev.*, **B39**, 8609 (1989).
- [5] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B24**, 4714 (1981).

- [6] C. Mailhot, Y. C. Chang and T. C. McGill, *Phys. Rev.*, **B26**, 4449 (1982).
- [7] C. Mailhot, Y. C. Chang and T. C. McGill, *Surf. Sci.*, **113**, 161 (1982).
- [8] R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Solid State Commun.*, **45**, 825 (1983).
- [9] 刘振鹏, 半导体学报, **5**, 327 (1984).
- [10] Zhenpeng Liu and Tianki Li, *J. Phys.* **C18**, 691 (1985).  
马德录, 刘振鹏, 半导体学报, **7**, 164 (1986).
- [11] Zhenpeng Liu and D. L. Lin, *Phys. Rev.* **B28**, 4413 (1983).
- [12] 朱嘉麟, 物理学报, **38**, 1093 (1989).
- [13] 李树深, 焦善庆, 半导体学报, **9**, 647 (1990).
- [14] Ronald L. Greene and K. K. Bajaj, *Phys. Rev.*, **B31**, 913 (1985).
- [15] T. Ando and S. Mori, *Surf. Sci.*, **113**, 124 (1982).

## Calculation of Binding Energy of Impurities in GaAs-GaAlAs Quantum Well in Vertical Electric Field

Li Shushen

(Department of Physics, Hebei Teachers' University, Shijazhuang, Hebei, 050016)

### Abstract

The effect of electric field on the subbands and binding energies of hydrogenic impurities in a GaAs-GaAlAs quantum well is studied by using the effective mass approximation. In calculations, the effects due to different effective masses and dielectric constants of electron in GaAs and GaAlAs layers are included. The numerical results show that the difference of effective masses in GaAs and GaAlAs strongly affects the subbands of electron in a quantum well and the vertical electric field strongly affects the binding energy of hydrogenic impurities when the width of the quantum well is small (approximately equals to  $10 \text{ \AA}$ ).