

在 $\text{GaAs}-\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 超晶格中 的浅杂质态

马德录 刘振鹏

(辽宁大学物理系)

1985年3月4日收到

本文用变分法计算了由大量等厚交替层组成的真实 $\text{GaAs}-\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 超晶格中浅杂质的基本束缚能。计算中考虑了由于 GaAs 和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 层不同有效质量和介电常数以及 GaAs 导带非抛物性的影响。束缚能作为层厚的函数只有一个峰，与 Chaudhuri 的预料一致。对于极薄的超晶格，束缚能趋于一稳定值。还计算了三量子阱情形的相应量并与 Chaudhuri 的结果作了比较，结果表明，对 $x = 0.4$ 的情形，束缚能主峰值的修正超过 16%。

一、引言

近年来，对处于多重量子阱异质结构中的浅杂质态已引起了广泛的理论和实验的兴趣^[1]。但几乎全部理论计算都限于单个量子阱情形，S. Chaudhuri^[2]首先计算了具有三个量子阱情形的类氢施主基态束缚能，结果表明，对阱、垒等宽的三阱结构，束缚能 E_B 与阱宽 L 的关系具有双峰结构，如图 1 所示。该作者曾指出， L 小的那个峰对真实超晶格（周期层状结构）来说应不存在。三阱模型与单阱模型相比，由于考虑了杂质波函数可以穿过近邻势垒而进入次一势阱中，这对于较窄和较低势垒的超晶格来说是非常必要的。但 Chaudhuri 对波函数只伸入到近邻势阱中的假设仍然是一个很大的限制，要克服这一限制，就必须对超晶格结构中的类氢杂质态进行计算。据我们所知，至今还没有人作过这样的计算，可能是因为传统的变分法无法克服无穷多个边界条件的困难。

本文利用本文作者之一所发展的方法^[3-7]，对于在等层厚 $\text{GaAs}-\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 周期结构（超晶格）中，处于阱中心的类氢杂质基态束缚能 E_B 作了计算，证实了 Chaudhuri 的上述设想。我们的计算还考虑了阱和垒材料不同的有效质量和介电常数的影响，以及阱材料导带的非抛物性影响；对层厚 $L \rightarrow 0$ 时的极限情形作了较详细的讨论，得到了这种情况下的束缚能 E_B 的精确表达式。实际计算表明，当层厚 L 充分小于材料的玻尔半径时， E_B 迅速趋于上述极限值。为比较起见，我们对相应的三阱情形也作了计算，并与 Chaudhuri 的结果作了比较，对 $x = 0.4$ 的情形，峰值修正超过 16%，说明 Chaudhuri 的结果，在相当大的 L 范围内只有定性的正确性。本文第二节讨论计算方法，第三节为数字计算和结果讨论。在附录中证明了两条定理，一条是关于 $L \rightarrow 0$ 时 E_B 的极限值，另一条是关于基态波函数的几何特性，它在数字计算中是很有用的。

二、计算方法

设类氢杂质处于 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 超晶格中，则超晶格结构对杂质电子形成一维多重量子阱，其中 GaAs 层为势阱，Ga_{1-x}Al_xAs 层为势垒，此一维周期势可近似用 Kronig-Penny 模型表征^[6]。设周期为 a ，阱宽和垒宽分别为 b 和 c ，则 $a = b + c$ 。令杂质坐标为 $(0, 0, z_0)$ ， z 轴垂直于层方向，则杂质电子的包络波函数所满足的薛定谔方程为：

$$\left\{ \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta \left(\frac{b}{2} - |z - na| \right) \right] H_1 + \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta \left(\frac{c}{2} - \left| z - \left(n + \frac{1}{2} \right) a \right| \right) \right] H_2 \right\} \varphi = E \psi. \quad (1)$$

式中：

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_1 r}, \quad (2a)$$

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_2 r} + V_0. \quad (2b)$$

其中 m_1 、 m_2 、 ϵ_1 、 ϵ_2 分别代表在 GaAs 和 Ga_{1-x}Al_xAs 中的电子有效质量和介电常数； V_0 为势垒高度； $r = [x^2 + y^2 + (z - z_0)^2]^{\frac{1}{2}}$ ； $\theta(x)$ 为阶跃函数。

波函数 ψ 满足边界条件^[7]：

$$\psi_- = \psi_+, \quad \frac{d\psi}{dz} \Big|_- = \alpha \frac{d\psi}{dz} \Big|_+. \quad (3)$$

其中下标代表 $|z - na| \rightarrow \frac{b}{2} \mp 0$ ； $\alpha = m_1/m_2$ 。

对于 $l = b/a$ 固定的条件下，对处于阱中心的杂质来说，显然当 $a \rightarrow \infty$ 时，方程具有精确解且与体 GaAs 中施主原子一致。当 $a \rightarrow 0$ 时，且 V_0 保持有限的情形下，附录中定理一指出，对于束缚态方程(1)可用在 z 方向的平均哈密顿相对应的方程代替：

$$\begin{aligned} & - \left\{ [l + \alpha(1-l)] \nabla^2 - \frac{2}{r} [l + \beta(1-l)] \right\} \psi \\ & - \left(E - \frac{e}{a} V_0 \right) \psi. \end{aligned} \quad (1)'$$

其中 $\beta = \epsilon_1/\epsilon_2$ 。自此以后，我们采用无量纲的哈密顿，即用体 GaAs 的有效玻尔半径 $a_B = \hbar^2 \epsilon_1 / m_1 e^2$ 为长度单位；用体 GaAs 的有效里德堡 $R = e^2 / 2\epsilon_1 a_B$ 为能量单位。则不难看出(1)'的基态波函数为：

$$\psi = \exp \left[-\frac{l + \beta(1-l)}{l + \alpha(1-l)} r \right]. \quad (4)$$

相应的束缚能为：

$$\begin{aligned} E_B & \equiv V_0 c / a - E \\ & = [l + \beta(1-l)]^2 / [l + \alpha(1-l)]. \end{aligned} \quad (5)$$

这是因为当 $a \rightarrow 0$ 时，第一导子带底的能量值为 $V_0 c / a$ 。

为了计算类氢施主的基态束缚能，首先必须确定当不存在库仑势时第一导子带底的能量值，这可由方程(1)中去掉库仑势求满足边界条件(3)的基态解得到，利用一般的量子力学方法可求得此能量 E_0 所满足的超越方程为：

$$\frac{\alpha^2 \xi^2 - \eta^2}{2\alpha \xi \eta} \sin(\eta b) \operatorname{sh}(\xi c) + \cos(\eta b) \operatorname{ch}(\xi c) = 1. \quad (6)$$

式中：

$$\xi = [m_2(V_0 - E_0)/m_1]^{1/2}, \quad \eta = (E_0)^{1/2}. \quad (7)$$

当 $\alpha = 1$ 时，方程(6)与普通 Kronig-Penny 模型基态解一致^[8]。当 l 固定， $\alpha \rightarrow 0$ 时，由方程(6)不难证明 $E_0 = (1 - l)V_0 = V_0c/\alpha$ 与 α 的大小无关。

为了求解方程(1)，我们采用文献[5]的方法得到相应于基态的一维化方程：

$$\left\{ \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta\left(\frac{b}{2} - |z - na|\right) \right] \tilde{H}_1 + \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta\left(\frac{c}{2} - \left|z - \left(n + \frac{1}{2}\right)a\right|\right) \right] \tilde{H}_2 \right\} w = Ew. \quad (8)$$

波函数 $w(r)$ 满足边界条件：

$$w_- = w_+, \quad \frac{dw}{dz} \Big|_- = \alpha \frac{dw}{dz} \Big|_+. \quad (9)$$

式中：

$$\tilde{H}_1 = -\frac{d^2}{dz^2} - \frac{1+\lambda}{t+1/2(1-\lambda)} - \frac{1}{4[t+1/2(1-\lambda)]^2}, \quad (10a)$$

$$\tilde{H}_2 = -\alpha \frac{d^2}{dz^2} + V_0 - \frac{\alpha(\lambda-1)+2\beta}{t+1/2(1-\lambda)} - \frac{\alpha}{4[t+1/2(1-\lambda)]^2}. \quad (10b)$$

这里 $t = |z - z_0|$ ， λ 为变分参数， $w(z)$ 和 $\varphi(x, y, z)$ 的关系为：

$$\psi(x, y, z) = e^{i\mu} \phi w(z) / \left(\int |\phi|^2 e^{2i\mu} dx dy \right)^{1/2}. \quad (11)$$

其中 ϕ 是类氢施主的基态解。由上式不难看出只要 $w(z)$ 是归一化的， ψ 就被归一化。

当 $\alpha \rightarrow 0$ 时，方程(8)可用相应的平均哈密顿的薛定谔方程代替：

$$[l\tilde{H}_1 + (1-l)\tilde{H}_2]w = Ew. \quad (12)$$

则当：

$$\lambda = -\frac{(1-l)(\beta-\alpha)}{l+(1-l)\alpha}, \quad (13)$$

方程具有解析解：

$$w = \left[t + \frac{1}{2(1-\lambda)} \right]^{1/2} e^{-(1-\lambda)t}. \quad (14)$$

相应的束缚能与(5)式所表示的精确值一致。此外，当：

$$\lambda = 1 - \frac{1}{2} \frac{l + \beta(1-l)}{l + \alpha(1-l)}, \quad (15)$$

方程具有奇字称第一激发态解：

$$w = (z - z_0) \left[t + \frac{1}{2(1-\lambda)} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-(1-\lambda)t}. \quad (16)$$

相应的束缚能为(5)式的 $1/4$, 与精确的 $2P_z$ 态相对应。当 $a \rightarrow \infty$ 时, 也具有与三维精确解一致的解析解。在 $V_0 \rightarrow \infty$ 时, 具有正确的极限行为^[9]。总之, 方程(8)在各种极限情形下具有与已知全部精确基态解相一致的解析解。对一般情形, 用与文献[5]相类似的证明可知方程(8)和边界条件(9)所确定的基态能量是精确值的上限(束缚能的下限)。由于方程没有奇异性, 因此用数字求解是方便的。在求解过程中, 变分参数 λ 必须调整使束缚能 E_B 取极小值。

对于势垒高且阱层较薄的情形, 第一导子带底的能量 E_0 变得较大, 此时 GaAs 导带的非抛物性的影响变得比较显著^[9, 10]。我们用文献[10]的方法及所引用的由 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 近似所得到的有效质量非抛物性表达式计算了这一影响, 该表达式为:

$$\begin{aligned} m_1^*/m_1 &\equiv Q \\ &= 1 + 3.803 \times 10^{-3}E + 1.194 \times 10^{-4}E^2 - 4.313 \times 10^{-7}E^3. \end{aligned} \quad (17)$$

这里 m_1 和 m_1^* 分别表示体 GaAs 导带底和相对于导带底能量为 E 处的电子有效质量。这里我们已将原式的能量单位由电子伏化为体 GaAs 的有效里德堡 $R = m_1 e^4 / 2\epsilon_0^2 \hbar^2$ 。对于我们所讨论的问题, 上式中的 E 相应于第一导子带底的能量 E_0 。这时, 相应的方程和边界条件必须作如下的改变: (6)式中的 η 和 α 应改成 $\eta' = \sqrt{QE_0}$ 和 $\alpha' = Q\alpha$; Q 中的 E 由 E_0 代替。于是由(6)经修改后的方程可求出相应于不同 b, c 值的 E_0 和 Q 的值。这时相应于方程(8)和(10)中的 \tilde{H}_1 应改成:

$$\tilde{H}'_1 = \frac{1}{Q} \left[\tilde{H}_1 - \frac{2(Q-1)}{t + 1/2(1-\lambda)} \right], \quad (10a)'$$

边界条件(9)变成:

$$w_- = w_+, \quad \left. \frac{dw}{dz} \right|_- = Q\alpha \left. \frac{dw}{dz} \right|_+. \quad (9)'$$

这时不难得到, 当 $a \rightarrow 0$ 时, 束缚能的极限值为:

$$E'_B = \frac{[l + \beta(1-l)]^2}{l + \alpha Q(1-l)} Q. \quad (5)'$$

其中的 Q 由(17)式中令 $E = cV_0/a$ 代入后求出。对于一般情况, 由求(8)修改后的方程及满足边界条件(9)'的数字解而得到考虑非抛物性影响的束缚能。

三、数字计算和结果讨论

为突出问题的主要特点, 我们考虑阱厚等于垒厚的情形, 即 $b = c = L$, 或 $l = 1/2$ 的情形。设杂质中心处于某个势阱的中心, 并选它为坐标原点, 则基态解在 z 方向为偶函数, 且 $\left. \frac{dw}{dz} \right|_{z=0} = 0$ 。

为了在存在周期势的情况下正确运用 Kramers^[11] 的波函数渐近行为判据以求得方程(8)的正确数字解, 我们在附录中的定理二证明了 $w(z)$ 是随 $|z|$ 增大而衰减的脉动函

数, 因此用 $\omega(s) \leq 0$ 或后一个峰值大于前一个峰值作为停机条件, 从而得到符合 Kramers 判据的正确本征态。另外采用特定的存储器 $S = \pm 1$ 在界面处改变符号并同时引进边界条件(9)以及由 S 的正负决定按 \tilde{H}_1 (阱内)还是 \tilde{H}_2 (垒内)计算, 这样就可以在保证必要的精度下使波函数的拖尾一直延伸下去而不受层数的限制。我们用 Runge-Kutta-Gill 法首先求满足界面条件(9)的具有不同有效质量和介电常数的 Kronig-Penny 模型的基本解并与解析表达式(6)作对照以检验程序的正确性。对于三阱情形, 只要使 S 在最外边界处变负后不再变号即可同样进行。

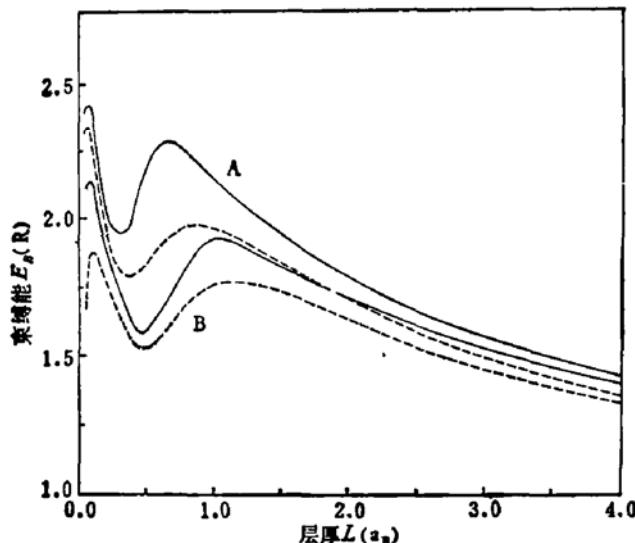


图 1 等层厚 $\text{GaAs}-\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 三阱结构中处于中心的施主基态束缚能与层厚的关系(虚线为 Chaudhuri 的结果, A 组为 $x = 0.4$, B 组为 $x = 0.1$ 的情形)

为便于比较, 我们取文献[2]的势垒参数:

$$V_0 = 0.85(1.155x + 0.37x^2) \text{ eV}. \quad (18)$$

材料参数 α 和 β 取文献[12]的数据。对三阱情形, 由于文献[2]忽略了两种材料的有效质量和介电常数的差别, 我们令: $\alpha = \beta = 1$, 计算结果表示在图 1 上。由图 1 可见束缚能 E_B 作为层厚 L 的函数具有双极大。而在全部 L 范围内, 我们的结果均优于文献[2]的结果。其中主峰 (L 大的峰)的修正达 16% ($x = 0.4$) 和 8% ($x = 0.1$) 以上, 因此[2]的结果在相当大的范围内只具有定性的正确性。这是因为 Chaudhuri 所采用的试探波函数过于简单所致。对于第二峰的出现, Chaudhuri 认为是由于 L 很小时三阱模型中两个半无限势垒的挤压所造成, 对真实的超晶格应不存在。

图 2 表示等层厚 $\text{GaAs}-\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 超晶格中施主束缚能 E_B 与层厚 L 的关系, 其中实线表示忽略两种材料的有效质量和介电常数差别的情形, 点线表示同样情况下三阱的结果, 可以看出当 $L \gtrsim 0.8$ ($x = 0.4$) 和 $L \gtrsim 1.2$ ($x = 0.1$) 时二者几乎重合。因此, 这时三阱模型是适用的。而当 L 进一步减小时, 波函数将穿越更多的势阱和势垒而使 E_B 随局域效应减小而下降。当 L 充分小于平均玻尔半径时, 空间非均匀性的影响愈来愈小。如图 2 所示, 当 $L \lesssim 0.2$ ($x = 0.4$) 和 $L \lesssim 0.4$ ($x = 0.1$) 时, E_B 迅速趋向 $L \rightarrow 0$ 时的平均哈密顿结果 ($E_B = 1$)。这与三阱情形不同, 三阱由于两个半无限势垒的挤压而使波函

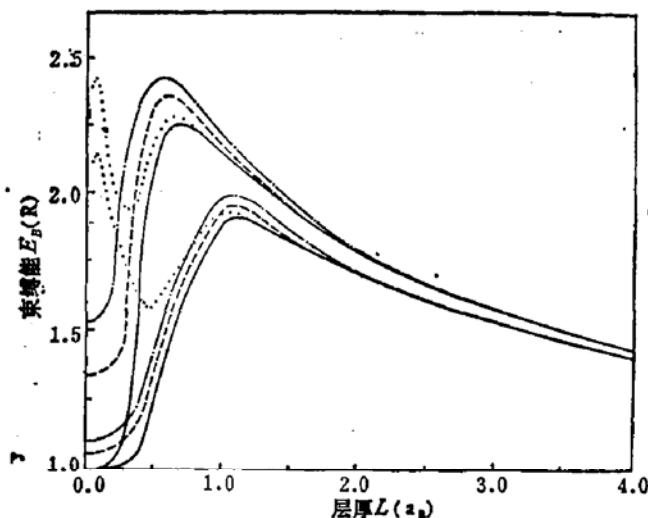


图 2 等层厚 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 超晶格中处于 GaAs 中心的类氢施主基态束缚能与层厚的关系(实线表示忽略两种材料 m 和 ϵ 的差别的情形, 点线表示相应的三阱情形, 虚线表示考虑了 m 和 ϵ 的差别的情形, 点划线表示在虚线基础上考虑导带非抛物性影响的情形。上面一组表示 $x = 0.4$, 下面一组表示 $x = 0.1$ 的情形)。

数再次局域化出现第二峰。图 2 中, 虚线表示考虑了两种材料 m 和 ϵ 的差别所得到的结果。由图 2 可看出当 $L \approx 0.2(x = 0.4)$ 和 $L \approx 0.3(x = 0.1)$ 时, E_B 已趋于由(5)所确定的极限值 $1.32(x = 0.4)$ 和 $1.08(x = 0.1)$ 。由图 2 可见, $\alpha = \beta = 1$, 在 $L \gtrsim 1.5$ 时是很好的近似。但在峰值, 不考虑 m 和 ϵ 的差别 $E_B \approx 2.25(L \approx 0.62, x = 0.4)$ 和 $E_B \approx 1.91(L \approx 1.1, x = 0.1)$ 。考虑 m 和 ϵ 的差别 $E_B \approx 2.38(L \approx 0.58, x = 0.4)$ 和 $E_B \approx 1.95(L \approx 1.07, x = 0.1)$ 。即考虑 m 和 ϵ 的差别峰值修正约为 6% ($x = 0.4$) 和 2% ($x = 0.1$)。图 2 还表明, 当考虑导带的非抛物性影响时束缚能普遍增大, 这与单阱情形相似^[10], 但修正量较小。在超晶格情况, 我们考虑了 m 和 ϵ 不同再考虑导带非抛物性的影响, 这时峰值为 $E_B \approx 2.44(L \approx 0.54, x = 0.4)$ 和 $E_B \approx 1.99(L \approx 1.05, x = 0.1)$, 即峰值修正约为 3% ($x = 0.4$) 和 2% ($x = 0.1$)。而文献[10]在单阱情况, 在忽略了 m 和 ϵ 差别的基础上考虑导带非抛物性影响, 峰值修正约为 20% ($x = 0.3$)。考虑了非抛物性影响后, 束缚能 E_B 在 $L \leq 0.2(x = 0.4)$ 和 $L \leq 0.3(x = 0.1)$ 趋近于由(5)' 确定的极限值 $1.53(x = 0.4)$ 和 $1.11(x = 0.1)$ 。此时的修正量最大, 约为 16% ($x = 0.4$) 和 3% ($x = 0.1$)。

图 3 表示考虑了两种材料 m 和 ϵ 差别情形 $(1 - \lambda)^{-1}$ 和 L 之间的关系。量 $(1 - \lambda)^{-1}$ 代表电子几率密度铺伸的范围^[13], 当 $L \rightarrow \infty$ 时, $(1 - \lambda)^{-1} \rightarrow 1$, 即 GaAs 中有效玻尔半径随着 L 的减小, 波函数的局域化增强。如图 3 所示, 当 $L \approx 0.58(x = 0.4)$ 和 $L \approx 1.07(x = 0.1)$ 时, $(1 - \lambda)^{-1}$ 取极小值, 分别为 $0.73(x = 0.4)$ 和 $0.81(x = 0.1)$ 。它们的位置与 E_B 的峰值基本相对应, 库仑吸引最强。当 L 进一步减小时, 波函数穿入势垒的成分增加, 减少了局域性, 且使平均势能增加而导致束缚能 E_B 的减小。最后当 $L \rightarrow 0$ 时, $(1 - \lambda)^{-1} \rightarrow (1 + \alpha)/(1 + \beta) \approx 0.794(x = 0.4), 0.941(x = 0.1)$, 这相当于由(4)确定的“平均材料”中的玻尔半径。

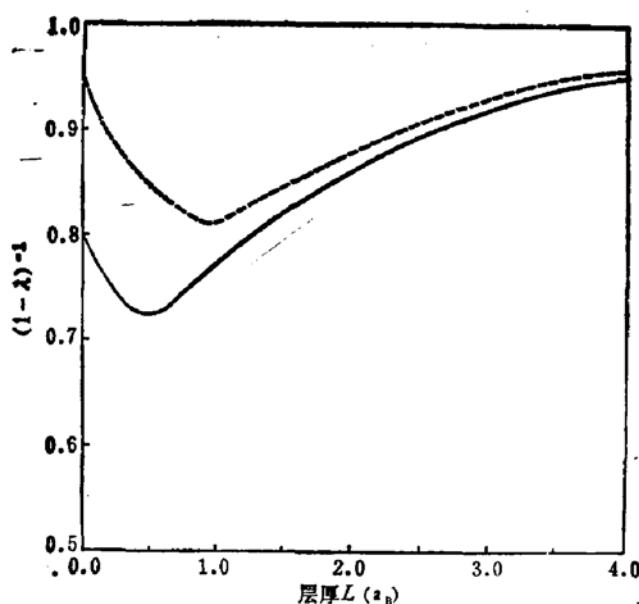


图3 $(1 - \lambda)^{-1}$ 与 L 的关系(实线为 $x = 0.4$,
虚线为 $x = 0.1$ 情形)

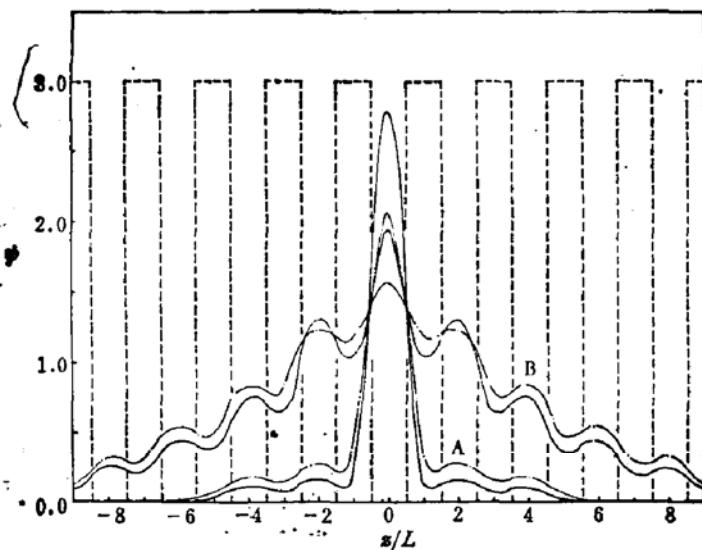


图4 归一化 $\psi(0, 0, z)$ 与 z/L 的关系(A 组为 $L = 0.5$,
B 组为 $L = 0.2$, 实线为 $x = 0.4$, 点划线为 $x = 0.1$ 的情形)

图4表示 $L = 0.5$ (A组)和 $L = 0.2$ (B组)两种情形的归一化波函数 $\psi(0, 0, z)$ 与 z/L 的关系, 实线表示 $x = 0.4$, 点划线表示 $x = 0.2$ 的情形。图中虚线表示界面及阱和垒的位置。由图4可见, 当 $L = 0.5$ 时, 波函数已开始伸入次近邻阱中, 因此三阱模型已不是好的近似。对 $L = 0.2$ 的情形, 波函数伸展已远远超出近邻阱, 三阱模型显然已不适用。

总的说来, 我们对超晶格中类氢施主基态束缚能的计算表明, 束缚能做为层厚的函数在窄层区出现与单阱及三阱情形明显不同的特点。对单阱来说, 随着阱宽 L 减小时束缚能 E_B 通过极值后迅速下降, $L \rightarrow 0$ 时, 它的斜率 $\frac{dE_B}{dL}$ 很大^[3]。对三阱情形, 束缚能 E_B 在

$L \rightarrow 0$ 时出现第二个峰。而超晶格，束缚能在 L 较小时存在一个相当宽的稳定区，它的斜率 $\frac{dE_B}{dL} \approx 0$ 。这是因为当 $L \rightarrow 0$ 时，对单阱和三阱来说，两边的半无限势垒对库仑中心的逼近增加了库仑中心附近电子几率分布的空间非均匀性，从而引起波函数的剧烈畸变。相反，对超晶格周期势垒而言，当 L 充分小于玻尔半径 a_B 时， L 的进一步减小将使穿过势垒的隧道效应显著加强，这对电子几率密度来说，空间的非均匀性反而减小，以致可以用均匀平均背景来代替。

此外，比较表明当 $L \approx 0.275(x = 0.4)$ 和 $L \approx 0.525(x = 0.1)$ 时，单阱施主束缚能曲线与超晶格第一导子带底相交并开始超过后者，当 L 比上述值稍小时，相应于单阱基态能级在此时成为连续谱的共振态。当 $L \approx 0.205(x = 0.4)$ 和 $L \approx 0.315(x = 0.1)$ 时，出现三阱共振态。这些共振态的出现将大大增加电离施主的 s 波散射截面，这一效应相信在超晶格的输运性质上将有所体现。

由于我们的计算考虑了两种材料的 m 和 ϵ 的差别以及导带非抛物性的影响，因此对极薄层的超晶格也将是适用的。最近对较厚层的超晶格中施主能级差 ($E_{2s} - E_{1s}$) 的测量表明和以往的单阱计算结果符合的很好^[1]，因为对厚层超晶格来说，单阱和多阱计算结果差别极微。我们的计算还有待于同极薄层超晶格的实验测量相比较，但目前由于对第一导子带底位置的精确测量很困难，因此也还难以直接精确地测定束缚能。

附 录

定理一 设哈密顿具有如下的形式：

$$H = \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta\left(\frac{b}{2} - |x - na|\right) \right] H_1 + \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \theta\left[\frac{c}{2} - |x - (n + \frac{1}{2})a|\right] \right\} H_2 \quad (A1)$$

其中 $a = b + c$ ， $\theta(x)$ 为阶跃函数， ψ 为 H 的本征态，满足条件 $\int \psi^* H \psi dxdy$ 有界，对一维情形只要 $\int \psi^* H \psi dx$ 可积即可，而在 $|x| = na + b/2$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) 界面处可以有 $\frac{d\psi}{dx}$ 的不连续性。则当 $b/a \equiv l$ 固定， $a \rightarrow 0$ 时， ψ 是平均哈密顿：

$$H = lH_1 + (1 - l)H_2, \quad (A2)$$

的本征态。

证：设 ψ 已归一化，且本征值为 E ，则

$$E = \int dz \left[\int \psi^* H \psi dxdy \right] = \int A(z) dz$$

其中 $A(z)$ 是 z 的连续有界函数，但在界面处导数可不连续，注意到 $a = b + c$ 及 (A1) 中 $\theta(x)$ 的特点，有：

$$\begin{aligned} E &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\int_{na-b/2}^{na+b/2} A_1(z) dz + \int_{(n+1/2)a-c/2}^{(n+1/2)a+c/2} A_2(z) dz \right] \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ A_1(na + \delta_n)b + A_2 \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) a + \delta'_n \right] c \right\} \end{aligned}$$

其中：

$$A_1(z) = \int \psi^* H_1 \psi dxdy \quad A_2(z) = \int \psi^* H_2 \psi dxdy \quad (A3)$$

δ_n 和 δ'_n 为 $(-\frac{b}{2}, \frac{b}{2})$, $(-\frac{c}{2}, \frac{c}{2})$ 中的某值。当 $a \rightarrow 0$ 时, b, c, δ_n 和 $\delta'_n \rightarrow 0$ 。

$$\begin{aligned} E &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ lA_1(na + \delta_n) + (1-l)A_2 \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) a + \delta'_n \right] \right\} a \\ &\approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{(n-1/2)a}^{(n+1/2)a} [lA_1(x) + (1-l)A_2(x)] dx \\ &= \int \phi^* [lH_1 + (1-l)H_2] \phi dx \end{aligned}$$

因此当 $a \rightarrow 0$ 时, ϕ 是 H 的本征态。

对于满足边界条件(3)及具有两种不同质量的一维 Kronig-Penny 模型, 当 $a \rightarrow 0$ 时, 其基态能显然是平均势垒高度, 即 $V_0 c/a$, 这与由(6)取极限的结果一致, 与 a 无关, 这时界面的影响消失。对势高为 V_0 的狄拉克梳的情形, 显然应该是 $V_0/a^{1/3}$ 。对存在库仑中心的情形, 由于束缚态波函数是指数衰减的, 故积分(A3)有界条件恒能满足, 定理是可用的。实际计算表明, 当 a 充分小于问题特征长度(或波长)时, 基态能已迅速趋于上述极限值。

定理二 设 (A1) 型哈密顿的基态是束缚态, u 是基态解, 其中:

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{d^2}{dx^2} + V_1 \\ H_2 &= -\alpha \frac{d^2}{dx^2} + V_2 + V_0 \end{aligned} \tag{A4}$$

满足边界条件(9), 其中 $a > 0$, V_1 和 $V_2 < 0$, 且是 $t = |x - x_0|$ 的单调上升函数((10)式中的两个相应势函数满足此条件), 则 $u(x)$ 是一个在主峰两侧衰减型的脉动函数。

证: 设 $V_1 = V_2 = 0$ 时满足边界条件的基态解为 ϕ , 本征值为 E_0 , 则很明显 ϕ 为一无零点的等幅脉动形周期函数^[14], 于是令 $u = \phi u$ 代入 (A4) 和 (A1) 中得到下列方程:

$$-\gamma \frac{d}{dx} \left(\phi^2 \frac{du}{dx} \right) + V' \phi^2 u = -E_B \phi^2 u \tag{A5}$$

其中 $E_B = E_0 - E$, 在阱中 $\gamma = 1$, $V' = V_1$, 在垒中 $\gamma = \alpha$, $V' = V_2$ 。由 (A4):

$$\frac{d}{dx} \left(\phi^2 \frac{du}{dx} \right) = -\frac{(|V'| - E_B)}{\gamma} \phi^2 u \tag{A6}$$

由于 u 无零点^[14], 故 u 也无零点。由 u 是束缚态, u 及 $\frac{du}{dx} \rightarrow 0$, 当 $x \rightarrow \pm \infty$ 时必有 $u \rightarrow 0$ 及 $\frac{du}{dx} \rightarrow 0$ 。

当 $x \rightarrow \pm \infty$ 时, 取 $u > 0$, 则 $E_B > 0$, 否则 $\frac{d}{dx} \left(\phi^2 \frac{du}{dx} \right)$ 恒小于零, 则 $\frac{du}{dx}$ 是 x 的单调递减函数, 不可能满足上述渐近行为。于是对 t 存在两个区域: 区域 I, $t < A$, $|V'| - E_B > 0$, 其中 A 为当 $|V'| = E_B$ 时的 t 值。在此区域中, $\frac{du}{dx}$ 为 x 的单调下降函数, 即仅可存在一个极大值, 对应于 $\frac{du}{dx} = 0$ 。区域 II, $t > A$, $|V'| - E_B < 0$, $\frac{du}{dx}$ 是单调递增函数, 但由于在 $x \rightarrow \pm \infty$ 时, $\frac{du}{dx} = 0$, 因此在负 x 段 $\frac{du}{dx} > 0$ 。在正 x 段 $\frac{du}{dx} < 0$, 即 u 为一单峰函数。虽然对 V_1 和 V_2 来说存在不同的 A 值, 使在两个 A 值之间的 u 存在上凸或下凹以及在界面处不光滑的细节, 但单峰函数的主要特点不变, 于是 u 必为某种在主峰两侧衰减型脉动函数。由于存在无数个次峰, 在求数字解时 Kramers 关于本征态的渐近行为的判据必须考虑这一特点。

参 考 文 献

[1] B. V. Shanabrook, J. Comas, T. A. Perry and Merlin, Phys. Rev., B29, 7096 (1984), 及其所引文献。

- [2] S. Chaudhuri, *Phys. Rev.*, **B28**, 4480 (1983).
- [3] 刘振鹏, 半导体学报, **4**, 313(1983).
- [4] Zhenpeng, Liu and D. L. Lin, *Phys. Rev.*, **B28**, 4413 (1983).
- [5] 刘振鹏, 李天克, 半导体学报, **6**, 32(1985).
- [6] T. Ando and S. Mori, *J. Phys. Soc. Japan*, **47**, 1518 (1979).
- [7] T. Ando and S. Mori, *Surf. Sci.*, **113**, 124 (1982).
- [8] R. de L. Kronig and W. G. Penny, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A130**, 499 (1931).
- [9] R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Solid State Commun.*, **45**, 825 (1983).
- [10] S. Chaudhuri and K. K. Bajaj, *Phys. Rev.*, **B29**, 1803 (1984).
- [11] H. A. Kramers, *Quatum Mechanics*, North-Holland Publishing Company-Amsterdam p. 54 (1957).
- [12] C. Mailhot, Y. C. Chang and T. C. McGill, *Phys. Rev.*, **B26**, 4449 (1982).
- [13] K. Tanaka, M. Nagaoka and T. Yamabe, *Phys. Rev.*, **B28**, 7068 (1983).
- [14] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Third-edition, Pergamon Press, p. 60(1977).
- [15] 曾谨言, *量子力学(上册)*, 科学出版社, p. 95 (1984).

Shallow Impurity State in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs Superlattices

Ma Delu and Liu Zhenpeng

(Department of Physics, Liaoning University)

Abstract

Binding energies of the ground state of a shallow impurity in real GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs superlattices with a large number of equal thickness alternating layers are calculated using a variational approach. In our calculations, the effects due to different effective masses and dielectric constants in GaAs and Ga_{1-x}Al_xAs layers and the non-parabolicity of GaAs conduction band are included. The binding energy is calculated as a function of layer thickness and exhibits only one peak as chaudhuri's expected. For very thin superlattices the binding energy approaches a stable value.

The corresponding quantity in the case of three quantum wells is also calculated and compared with chaudhuri's result. It is shown that when $x=0.4$ the correction of the main peak value of binding energy exceeds 16%.