

半导体超晶格的带间集体激发

秦 国 肖

(南京大学物理系)

1985年4月13日收到

本文用自洽的线性响应理论，在类似于紧束缚近似的条件下计算了非扁平子带间的集体激发谱。结果是不仅文献[3]导出的无重叠模式有显著的修正，而且出现了两支纯由层间波函数的重叠效应引起的新模式。

本文的方法可直接用于带内激发和存在垂直磁场时磁等离子激发的研究，并为建立半导体超晶格内非扁平子带间的光吸收理论以及鞍点激子理论奠定了基础。

一、引言

无限的半导体超晶格内电子集体激发谱的研究已经渐趋完善^[1-4]，但是正如文献[4]所述，也还有一些问题尚待解决，其中最重要的是：以往的研究全都忽略了相邻量子阱的波函数之间的重叠。层厚愈薄，这种重叠愈大，使原先分裂的能级扩展为非平的子带。我们先后用自洽的线性响应理论和局域表象的格林函数理论^[5,6]，讨论了计及重叠效应后所形成的非平子带的带内和带间集体激发。可以证明，当用布洛赫函数为基底进行计算时，两种方法导得相同的色散方程。而在用线性响应理论进行计算时，还可以用 Wannier 函数作为基底，由此导出的色散方程可以对称化而且大大减轻了求解的工作量。本文将专门介绍上述最后一种方法并用以计算了计及重叠效应后，无限的第Ⅰ类半导体超晶格内的带间电子集体激发谱。结果表明重叠效应不仅使原有的一支忽略重叠效应而得的模式^[3]

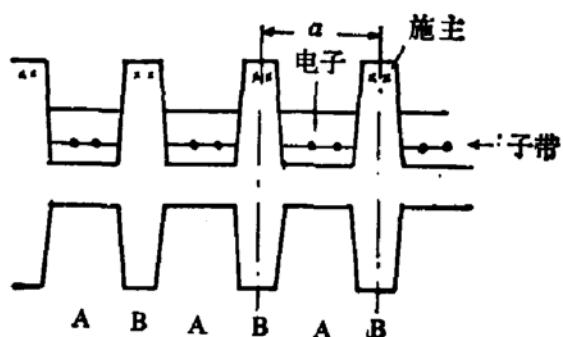


图1 第Ⅰ类半导体超晶格的能带图。

A层代表 GaAs 层，

B层代表 $Ga_xAl_{1-x}As$ 层。

有显著的修正,而且得到了纯由重叠效应引起的二支全新的模式,我们分别称之为第一支和第二支层间耦合模式。

以 $\text{GaAs}/\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ 系列为代表的第 I 类半导体超晶格的能带结构如图 1 所示,可以把它们视作一系列被势垒隔开的赝二维量子阱的阵列。另外,正如文献[5]所述, $n-i-p-i$ 型半导体超晶格中,空穴的效应可以忽略,因此本文的方法也适用于这一类超晶格。

赝二维量子阱的波函数可表为:

$$|n, l, k\rangle = e^{ikr}|n, l\rangle = e^{ikr}W_n(z - la) \quad (1)$$

其中 l 是阱或层指标, $W_n(z - la)$ 是第 l 个阱(层)内的 Wannier 函数, n 是和 z 方向电子运动相对应的子带指标, a 是阱(层)间的距离, r 是平行于层面 ($x-y$ 平面) 的位置矢量, k 是平行于层面方向的波矢。

在紧束缚近似下,即认为只有紧邻层的波函数之间才有显著的重叠时,零级近似哈密顿算符可写成:

$$\hat{H}_0 = |n, l, k\rangle E_{nlk}^0 \langle n, l, k| + \sum_l |n, l \pm 1, k\rangle V_n \langle n, l, k| \quad (2)$$

其中 $|n, l, k\rangle$ 由(1)式定义。

$$E_{nlk}^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \varepsilon_n^0 = \varepsilon_k + \varepsilon_n^0 \quad (3)$$

ε_k 是层面内电子自由运动的能量而 ε_n^0 是第 n 个子带的中心能量。

二、外场中的线性响应函数

假定外微扰的形式为:

$$\nu^{\text{ext}}(\mathbf{r}, t, z) = \nu^{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega; z) \exp(i\omega t - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (4-1)$$

则类似地感应势和感应电子密度等可表为:

$$\nu^{\text{ind}}(\mathbf{r}, t, z) = \nu^{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega, z) \exp(i\omega t - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (4-2)$$

$$\delta n(\mathbf{r}, t, z) = \delta n(\mathbf{q}, \omega, z) \exp(i\omega t - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (4-3)$$

其中 \mathbf{q} 是平行于层面方向的波矢。

总密度矩阵为:

$$\rho = \rho_0 + \rho_1 \quad (5)$$

式中 ρ_0 是外微扰引进前系统的密度矩阵。

总的自治势是

$$\theta = \nu^{\text{ext}} + \nu^{\text{ind}} \quad (6)$$

感应电子密度可用如下公式求出:

$$\delta n(\mathbf{r}, t, z) = T'[\rho_1 \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] = \sum_{\alpha\alpha'} \langle \alpha | \rho_1 | \alpha' \rangle \langle \alpha' | \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') | \alpha \rangle \quad (7)$$

式中 T' 表示对带撇的坐标求迹, α 代表复合指标 n, l, k , 利用(1)式容易求得:

$$\langle \alpha' | \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') | \alpha \rangle = e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot \mathbf{r}} W_{\alpha'}^*(z - l'a) W_\alpha(z - la) \quad (8)$$

将(8)式代入(7)式再利用(4)式可得:

$$\delta n(\mathbf{q}, \omega, z) = \sum_{\substack{n' \\ n'l'}} \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \langle n, l | \rho_1 | n' l' \rangle W_{n'}^*(z - l'a) W_n(z - la) \quad (9)$$

感应势通过泊松方程与感应电子密度相联系

$$\nabla^2 v^{\text{ind}}(\mathbf{r}, z) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_s} \delta n(\mathbf{r}, z)$$

由此可解出：

$$v^{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega, z) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_s q} \int_{-\infty}^{\infty} dz' V(\mathbf{q}; z, z') \delta n(\mathbf{q}, \omega, z') \quad (10)$$

式中

$$V(\mathbf{q}; z, z') = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_s q} e^{-q|z-z'|} \quad (11)$$

将(9)式代入(10)再作指标变换，并对等式两边求矩阵元可得：

$$\begin{aligned} \langle n, l | v^{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega, z) | n', l' \rangle &= \sum_{m l'} \sum_{m' l} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}} \langle m, l' | \rho_1 | m' l \rangle \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' W_n^*(z - la) W_{m'}^*(z' - l'a) V(\mathbf{q}; z, z') W_m(z' - l'a) W_{n'}(z - l'a) \end{aligned} \quad (12)$$

若系统的温度相当低而电子的密度又不高时，可以认为只有基子带被占（电量子极限）于是可令 $n' = m' = 0$ ，不妨再令 $m = n$ ，这相当于假定不同的带间激发之间没有混合^[3]，于是得到：

$$\begin{aligned} \langle n, l | v^{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega, z) | 0, l' \rangle &= \sum_l \sum_{l'} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \{ \langle n, l' | \rho_1(\mathbf{q}, \omega, z) | 0, l' \rangle \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' W_n^*(z) W_0^*(z' - (l - l)a) V(\mathbf{q}, z + la, z' + l'a) \\ &\times W_n(z') W_0(z - (l - l)a) \} \end{aligned} \quad (13)$$

显然，只考虑紧邻层波函数的重叠时， \bar{l} 和 \bar{l} 只能分别取 $\bar{l} = l$, $l + 1$, $l - 1$, $\bar{l} = l$, $l + 1$, $l - 1$ 。

ρ_1 的矩阵元可由运动方程导出，因 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \theta$ (分别由(2)式及(6)式定义)所以

$$\dot{\rho} = \dot{\rho}_0 + \dot{\rho}_1 = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_0 + \theta, \rho_0 + \rho_1] \quad (14)$$

注意到

$$\dot{\rho}_0 = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_0, \rho_0]$$

再略去二级以上小量 $[\theta, \rho_1]$ 并利用

$$\langle n', l | \hat{H}_0 | n', l \rangle = E_{n'n'}^0; \langle n', l | \hat{H}_0 | n', l \pm 1 \rangle = V_{n'l} \quad (15)$$

可从(14)式导得：

$$\begin{aligned} \langle n, l | \rho_1 | n', l \rangle &= \pi_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) \langle n, l | \theta | n', l \rangle \\ &+ k_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) \langle n, l | \theta | n', l + 1 \rangle + G_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) \langle n, l | \theta | n', l - 1 \rangle \end{aligned} \quad (16-1)$$

$$\langle n, l | \rho_1 | n', l + 1 \rangle = \pi_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) \langle n, l | \theta | n', l + 1 \rangle + G_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) \langle n, l | \theta | n', l \rangle \quad (16-2)$$

$$\langle n, l | \rho_1 | n', l - 1 \rangle = \pi_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) \langle n, l | \theta | n', l - 1 \rangle + k_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) \langle n, l | \theta | n', l \rangle \quad (16-3)$$

式中

$$\pi_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) = \frac{f(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) - f(E_{n,\hbar}^0)}{E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0 - E_{n,\hbar}^0 - \hbar\omega} \quad (17-1)$$

$$k_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) = \frac{f'(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) - f'(E_{n,\hbar}^0) e^{-ik_s a}}{f'(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) - f'(E_{n,\hbar}^0)} T_{nn'}^* + \frac{V_n e^{-ik_s a} - V_{n'}}{V_n - V_{n'}} Q_{nn'}^* \quad (17-2)$$

$$G_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) = \frac{f'(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) - f'(E_{n,\hbar}^0) e^{ik_s a}}{f'(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) - f'(E_{n,\hbar}^0)} T_{nn'}^* + \frac{V_n e^{ik_s a} - V_{n'}}{V_n - V_{n'}} Q_{nn'}^* \quad (17-3)$$

其中

$$T_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) = \frac{f'(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) - f'(E_{n,\hbar}^0)}{E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0 - E_{n,\hbar}^0 - \hbar\omega} \quad (17-4)$$

$$Q_{nn'}^*(\mathbf{q}, \omega) = \frac{(V_n - V_{n'})(f(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) - f(E_{n,\hbar}^0))}{(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0 - E_{n,\hbar}^0 - \hbar\omega)^2} \quad (17-5)$$

上面诸式中 $f(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) = \langle n' l | \rho_0 | n', l \rangle$ 是费米分布函数, 而 $f'(E_{n',\hbar+\mathbf{q}}^0) = \langle n', l | \rho_0 | n', l \pm 1 \rangle$, 上面各式中的 n' 在取电量子极限后实际为零, 但是为了后面对称操作的简便仍记作 n' .

由于超晶格在轴向(z 方向)存在着平移对称性, 故可把文献[3]引进的 Ansatz 推广为:

$$\left\langle n, l | \vartheta | n', l \right\rangle = \left\langle n, \tilde{l} | \vartheta | n', \tilde{l} \right\rangle e^{ik_s(l-\tilde{l})a} \quad (18)$$

该式定义了各层中电子密度振荡的相对位相, 导出(16)式时已经用了这一关系。

把(16)式代入(13)式, 可得矩阵元 $\langle n, l | v^{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega; z) | n', \tilde{l} \rangle$ 的表式, 在此等式两边都加上 $\langle n, l | v^{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega; z) | n', \tilde{l} \rangle$, 利用(6)式便得到总自治势的矩阵元表式, 最后令外微扰趋向于零 ($v^{\text{ext}} = 0$), 这时系统内的自持振荡应依然存在, 于是得到矩阵元 $\langle n, l | \vartheta | n', \tilde{l} \rangle$ 的表式.

再利用 Ansatz (18), 注意到:

$$\begin{aligned} S_1(q, k_s) &= \sum_{l'} \vartheta(l-l') e^{-ik_s(l-l')a} e^{-qa(l-l')a} = \frac{1}{1 - e^{-ik_s a} e^{-qa}} - 1 \\ S_2(q, k_s) &= \sum_{l'} \vartheta(l'-l) e^{-ik_s(l-l')a} e^{qa(l-l')a} = \frac{1}{1 - e^{ik_s a} e^{-qa}} - 1 \\ S_1 + S_2 &= \frac{\sinh qa}{\cosh qa - \cos k_s a} - 1 = S(q, k_s) - 1 \end{aligned} \quad (19)$$

$\vartheta(l-l')$ 是台阶函数

$$\vartheta(l-l') = \begin{cases} 0 & \text{当 } l < l' \\ 1 & \text{当 } l > l' \end{cases}$$

于是矩阵元 $\langle n, l | \vartheta | n', \tilde{l} \rangle$ 的表式最终化为:

$$\begin{aligned} \langle n, 0 | \vartheta | n', d \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} [\pi_{nn'}^* V(0, 0, 0, da) + G_{nn'}^* V(0, -a, 0, da) \\ &\quad + k_{nn'}^* V(0, a, 0, da)] \langle n, 0 | \vartheta | n', 0 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_k [\pi_{nn'}^* V(0, -a, 0, da) + k_{nn'}^* V(0, 0, 0, da)] \langle n, 0 | \vartheta | n', 1 \rangle \\
& + \sum_k [\pi_{nn'}^* V(0, a, 0, da) + G_{nn'}^* V(0, 0, 0, da)] \langle n, 0 | \vartheta | n', -1 \rangle
\end{aligned} \quad (20)$$

a 可以分别取 1, 0, -1 三个值, 因此(20)式实即一组三个线性齐次方程, 式中的 $V(a, b, c, e)$ 的定义是:

$$V(a, b, c, e) = \hat{V}(a, b, c, e) + S_1 \tilde{V}(a, b, c, e) + S_2 \bar{V}(a, b, c, e) \quad (21)$$

S_1 和 S_2 由(19)式定义, 而:

$$\begin{aligned}
\hat{V}(a, b, c, e) &= \frac{2\pi e^2}{\epsilon_s q} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' e^{-q|z-z'|} W_n^*(z-a) W_{n'}^*(z'-b) \\
&\quad \times W_n(z'-c) W_{n'}(z-c) \\
\tilde{V}(a, b, c, e) &= \frac{2\pi e^2}{\epsilon_s q} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' e^{-q(z-z')} W_n^*(z-a) W_{n'}^*(z'-b) \\
&\quad \times W_n(z'-c) W_{n'}(z-c) \\
\bar{V}(a, b, c, e) &= \frac{2\pi e^2}{\epsilon_s q} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' e^{q(z-z')} W_n^*(z-a) W_{n'}^*(z'-b) \\
&\quad \times W_n(z'-c) W_{n'}(z-c)
\end{aligned} \quad (22)$$

在长波极限下, q 是小量可将上式中指数作展开, 再利用 Wannier 函数的正交性可求得:

$$V(0, 0, 0, 0) = \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left(\alpha_{nn}^{(1)} - \mu_{nn} s q + \frac{1}{6} \alpha_{nn}^{(3)} q^2 \right) \quad (23-1)$$

$$V(0, a, 0, 0) = \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \left(\tilde{\alpha}_{nn}^{(1)} - \tilde{\mu}_{nn}^+ s q + \frac{1}{6} \tilde{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right) + (\tilde{\eta}_{nn}^+ - \tilde{\gamma}_{nn}^+) (S_2 - S_1) q^2 \right\} \quad (23-2)$$

$$V(0, -a, 0, 0) = \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \left(\tilde{\alpha}_{nn}^{(1)} - \tilde{\mu}_{nn}^- s q + \frac{1}{6} \tilde{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right) + (\tilde{\eta}_{nn}^- - \tilde{\gamma}_{nn}^-) (S_2 - S_1) q^2 \right\} \quad (23-3)$$

将 $V(0, a, 0, 0)$ 中 $\tilde{\eta}_{nn}^+$ 和 $\tilde{\gamma}_{nn}^+$ 交换即得 $\bar{V}(0, 0, 0, a)$ 将; $\bar{V}(0, -a, 0, 0)$ 中 $\tilde{\eta}_{nn}^-$ 和 $\tilde{\gamma}_{nn}^-$ 交换即得 $V(0, 0, 0, -a)$;

$$V(0, a, 0, a) = \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \tilde{\alpha}_{nn}^{+(1)} - \tilde{\mu}_{nn}^+ s q + \frac{1}{6} \tilde{\alpha}_{nn}^{+(3)} q^2 \right\}$$

将此式中, $\tilde{\mu}_{nn}^+$ 换为 $\tilde{\mu}_{nn}^-$ 即得 $V(0, -a, 0, -a)$,

$$V(0, a, 0, -a) = A + B; \quad V(0, -a, 0, a) = A - B \quad (23-4)$$

$$A = \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \tilde{\alpha}_{nn}^{-(1)} - \tilde{\mu}_{nn}^- s q + \frac{1}{6} \tilde{\alpha}_{nn}^{-(3)} q^2 \right\}, \quad B = (\tilde{\gamma}_{nn}^- - \tilde{\eta}_{nn}^-) (S_2 - S_1) q^2 \quad (23-5)$$

上列各式中 $Q_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar}$, \tilde{N}_s 是修正的电子二维面密度, 其定义将在后面交待。其它各量定义为:

$$\alpha_{nn}^{(N)} = \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\epsilon_s} (-L_{nn}^{(N)}),$$

$$\begin{aligned}
 L_{nn}^{(N)} &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' W_n^*(z) W_0^*(z') |z - z'|^N W_n(z') W_0(z); N = 1, 3 \\
 \mu_{nn} &= \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_s} (z_{n0})^2, \\
 z_{n0} &= \int_{-\infty}^{\infty} dz W_n^*(z) z W_0(z); \hat{\mu}_{nn}^{\pm} = \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_s} (z_{n0}) (z_{n0}^{0,\pm}) \\
 z_{n0}^{0,\pm} &= \int_{-\infty}^{\infty} dz W_n(z) z W_0(z \mp a); \hat{\gamma}_{nn}^{\pm} = \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_s} \frac{1}{2} (z^2)_{n0} (z_{n0}^{0,\pm}) \\
 \hat{\mu}_{nn}^{\pm} &= \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_s} (z_{n0}^{0,\pm})^2; \hat{\eta}_{nn}^{\pm} = \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_s} \frac{1}{2} (z_{n0}) (z^2)_{n0}^{0,\pm} \\
 \hat{d}_{nn}^{(N)} &= \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_s} (-M_{nn}^{(N)}); \\
 M_{nn}^{(N)} &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' W_n(z) W_0(z-a) |z-z'|^N W_n(z') W_0(z) \\
 \hat{d}_{nn}^{\pm(N)} &= \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar Q_{n0}} \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_s} (-N_{nn}^{\pm(N)}); \\
 N_{nn}^{\pm(N)} &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' W_n^*(z) W_0^*(z-a) |z-z'|^N W_n(z') W_0(z-a)
 \end{aligned} \tag{24}$$

具体计算时, 总选用实的一维局域波函数来代替 Wannier 函数^{[3][4]}, 当 $W_n(z)$ 及 $W_0(z)$ 取为实函数时(20)式可以对称化, 其步骤是:

- (i) 同样从(14)式出发, 求出矩阵元 $\langle n, l | \rho_1 | n', l \rangle$ 的表式。
- (ii) 利用(13)式、(18)式及上述矩阵元表式可导得关于 $\langle n, 0 | \theta | n', 0 \rangle$, $\langle n, 1 | \theta | n', 0 \rangle$ 与 $\langle n, -1 | \theta | n', 0 \rangle$ 的三个线性齐次方程。
- (iii) 将所得方程中的 n 和 n' 指标对换, 再注意到 $W_n(z)$ 及 $W_0(z)$ 是实函数, 所以 $\langle n', l' | \theta | n, l \rangle = \langle n, l | \theta | n', l' \rangle$, 而且指标对换后 $V(a, b, c, e) = V(e, c, b, a)$ (参阅(21)式)因此得到:

$$\begin{aligned}
 \langle n, 0 | \theta | n', d \rangle &= \sum_k [\pi_{n'n}^* V(0, 0, 0, da) + e^{ik_x a} k_{n'n}^* V(0, -a, 0, da) \\
 &\quad + e^{-ik_x a} G_{n'n}^* V(0, a, 0, da)] \langle n, 0 | \theta | n', 0 \rangle \\
 &\quad + \sum_k [\pi_{n'n}^* V(0, -a, 0, da) + e^{-ik_x a} G_{n'n}^* V(0, 0, 0, da)] \langle n, 0 | \theta | n', 1 \rangle \\
 &\quad + \sum_k [\pi_{n'n}^* V(0, a, 0, da) + e^{ik_x a} k_{n'n}^* V(0, 0, 0, da)] \langle n, 0 | \theta | n', -1 \rangle
 \end{aligned} \tag{25}$$

式中 d 可分别取 $1, 0, -1$, 三个值, 因此(25)式也是一组三个线性齐次方程, 将(20)式各式与(25)式中对应的表式相加再除以 2, 即完成了对称化手续, 结果是(20)式中的 $\pi_{n'n}^*$, $G_{n'n}^*$, $k_{n'n}^*$ 和 $T_{n'n}^*$, 都被相应的对称化表式所替换, 即:

$$\begin{aligned}
 \pi_{n'n'}^* &\text{ 换为 } x_{n'n'}^* = (\pi_{nn'}^* + \pi_{n'n}^*) \\
 G_{n'n'}^* &\text{ 换为 } G_{n'n'}^{*f} = G_{nn'}^* + e^{ik_x a} k_{n'n}^*
 \end{aligned} \tag{26-1}$$

$$= \frac{f'(E_{n',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) - f'(E_{n,\mathbf{k}}^0)e^{ik_x a}}{f'(E_{n',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) - f'(E_{n,\mathbf{k}}^0)} T_{nn'}^{*\prime} + \frac{V_n e^{ik_x a} - V_{n'}}{V_n - V_{n'}} Q_{nn'}^{*\prime}, \quad (26-2)$$

$k_{nn'}^*$ 换为 $k_{nn'}^{*\prime} = k_{nn'}^* + e^{-ik_x a} G_{nn'}^*$, (只要把 $G_{nn'}^*$ 中的 k_x 换为 $-k_x$ 即得到了 $k_{nn'}^{*\prime}$ 的表式。) 上式中 $T_{nn'}^{*\prime} = T_{nn'}^* + T_{n'n}^*$; $Q_{nn'}^{*\prime} = Q_{nn'}^* + Q_{n'n}^*$

$q \ll$ 费米波矢 k_F 的长波极限下 $\sum_k x_{n0}^*$ 的表式是熟知的, 本文计及了紧邻层波函数的重叠因此原表式中的 k_F 应换为 $\tilde{k}_F = \sqrt{k_F^2 + \frac{8mV_0}{\hbar^2}}$, $4V_0$ 是基子带的最大宽度 (参阅(2)式), 因此

$$\sum_k x_{n0}^* = \frac{2\tilde{N}_s}{\hbar} \frac{1}{\omega^2 - \left(\Omega_{n0} + \frac{\hbar q^2}{2m}\right)^2} \left\{ \left(\Omega_{n0} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right) + \frac{1}{4} (q\tilde{v}_F)^2 \frac{\Omega_{n0}(3\omega^2 + \Omega_{n0}^2)}{\left[\omega^2 - \left(\Omega_{n0} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2 \right]^2} \right\} \quad (27)$$

式中

$$\tilde{v}_F = \frac{\hbar \tilde{k}_F}{m}, \quad \tilde{N}_s = \frac{\tilde{k}_F^2}{2\pi}, \quad \Omega_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar}, \quad \tilde{E}_F = \frac{\hbar^2 \tilde{k}_F^2}{2m}$$

$\sum_k T_{n0}^{*\prime}$ 和 $\sum_k Q_{n0}^{*\prime}$ 的计算较繁, 先要将 Wannier 函数用布洛赫函数展开, 后者是 \hat{H}_0 的本征函数在紧束缚近似下本征值为 $E_{n,\mathbf{k}}^0 + 2V_n \cos k_x a$, 再利用 0K 时费米分布函数的一次导数是 Delta 函数, 因此容易完成积分而求得 $f'(E_{n,\mathbf{k}}^0)$ (见(17)式后的定义), 然后用导出 $\sum_k x_{n0}^*$ 相似的步骤可求得:

$$\begin{aligned} & \sum_k T_{n0}^{*\prime} \\ &= \frac{\tilde{N}_s}{\hbar} \frac{V_0}{\tilde{E}_F} \frac{1}{\omega^2 - \left(\Omega_{n0} + \frac{\hbar q^2}{2m}\right)^2} \left\{ \left(\Omega_{n0} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right) + \frac{1}{2} (q\tilde{v}_F)^2 \frac{\Omega_{n0}(3\omega^2 + \Omega_{n0}^2)}{\left[\omega^2 - \left(\Omega_{n0} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2 \right]^2} \right\} \\ & \sum_k Q_{n0}^{*\prime} = \frac{\tilde{N}_s}{\hbar} \frac{(V_n - V_0)}{\hbar \Omega_{n0}} \frac{\left[(\omega^2 + \Omega_{n0}^2) + \frac{\hbar q^2}{m} \Omega_{n0} \right] \Omega_{n0}}{\left[\omega^2 - \left(\Omega_{n0} + \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2 \right]^2} \end{aligned} \quad (28)$$

三、第 I 类半导体超晶格的带间集体激发谱

令对称化后的(20)式的系数行列式等于零, 就可确定集体激发的色散关系:

$$\begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{pmatrix} = 0 \quad (29)$$

式中

$$D_{11} = \sum_k [x_{n0}^* V(0, 0, 0, 0) + G_{n0}^{*'} V(0, -a, 0, 0) + k_{n0}^{*'} V(0, a, 0, 0)] - 1$$

$$D_{12} = \sum_k [x_{n0}^* V(0, -a, 0, 0) + K_{n0}^{*'} V(0, 0, 0, 0)]$$

$$D_{13} = \sum_k [x_{n0}^* V(0, a, 0, 0) + G_{n0}^{*'} V(0, 0, 0, 0)]$$

其它元素也可从(20)式得到。

如果略去相邻层波函数之间的重叠，则重叠积分 $V(0, a, 0, 0), V(0, -a, 0, 0), V(0, -a, 0, -a)$ 等都为零，因此(29)式退化为：

$$\begin{aligned} & 1 - \sum_k x_{n0}^*(q, \omega) V(0, 0, 0, 0) \\ &= 1 - \sum_k x_{n0}^*(q, \omega) \frac{\hbar Q_{n0}}{2N_s} \left(\alpha_{nn}^{(1)} - \mu_{nn} q_s + \frac{1}{6} \alpha_{nn}^{(3)} q^2 \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (30)$$

这正是文献[3]的结果，今后我们称此为无重叠体模式。如果进而令 $W_n^2(z - la) = \delta(z - la)$ 则(30)式又进而退化为 Das Sarma 等的结果^[1]。

下面讨论重叠显著而不能忽略的情形，首先讨论 $k_s a = 0$ 的情形，这时利用行列式的运算规则，可以将(29)式化为：

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \cdot A_{33} = 0 \quad (31)$$

其中

$$\begin{aligned} A_{11} &= \sum_k x_{n0}^* \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \alpha_{nn}^{(1)} - \mu_{nn} q_s + \frac{1}{6} \alpha_{nn}^{(3)} q^2 \right\} \\ &\quad + \sum_k (G_{n0}^{*'} + k_{n0}^{*'}) \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \hat{\alpha}_{nn}^{(1)} - \hat{\mu}_{nn} q_s + \frac{1}{6} \hat{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right\} \\ A_{21} &= \sum_k x_{n0}^* \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \hat{\beta}_{nn}^{(1)} - 2\hat{\mu}_{nn} q_s + \frac{1}{6} \hat{\beta}_{nn}^{(3)} q^2 \right\} \\ &\quad + \sum_k 2k_{n0}^{*'} \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \hat{\alpha}_{nn}^{(1)} - \hat{\mu}_{nn}^+ q_s + \frac{1}{6} \hat{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right\} - 1 \\ A_{12} &= \sum_k x_{n0}^* \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \hat{\alpha}_{nn}^{(1)} - \hat{\mu}_{nn}^- q_s + \frac{1}{6} \hat{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right\} \\ &\quad + \sum_k k_{n0}^{*'} \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \alpha_{nn}^{(1)} - \mu_{nn} q_s + \frac{1}{6} \alpha_{nn}^{(3)} q^2 \right\} \\ A_{21} &= \sum_k 2x_{n0}^* \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \hat{\alpha}_{nn}^{(1)} - \hat{\mu}_{nn}^+ q_s + \frac{1}{6} \hat{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right\} \\ &\quad + \sum_k (G_{n0}^{*'} + k_{n0}^{*'}) \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \hat{\beta}_{nn}^{(1)} - 2\hat{\mu}_{nn} q_s + \frac{1}{6} \hat{\beta}_{nn}^{(3)} q^2 \right\} \\ A_{33} &= \sum_k x_{n0}^* \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \hat{\alpha}_{nn}^{(1)} - \mu_{nn}^{(4)} q_s + \frac{1}{6} \hat{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right\} - 1 \end{aligned}$$

式中各量的定义请见(24)式， $\hat{\beta}_{nn}^{(N)} = \hat{\alpha}_{nn}^{-(N)} + \hat{\alpha}_{nn}^{+(N)}$ ； $N = 1, 3$ ，

$$\tilde{\alpha}_{nn}^{(N)} = \tilde{\alpha}_{nn}^{-(N)} - \tilde{\alpha}_{nn}^{+(N)}; N = 1, 3; \mu_{nn}^{(4)} = \tilde{\mu}_{nn}^- - \tilde{\mu}_{nn}^+$$

由 $\Lambda_{33} = 0$ 可导得一支带间激发模式。假定色散关系为 $\omega^2 = a + bq + cq^2 (a, b, c$ 为待定常系数), 以此代入 $\Lambda_{33} = 0$, 将通式乘以 $\left[(a - Q_{n0}^2) + bq + \left(c - \frac{\hbar Q_{n0}}{2m} \right) q^2 \right]^3$, 然后令 q 的各同次幂项的系数等于零, 可求出 a, b, c 的表式, 最后写出这支模式的解析形式为:

$$\begin{aligned} \omega^2 &= Q_{n0}^2 (1 + \tilde{\alpha}_{nn}^{(1)}) - Q_{n0}^2 (\mu_{nn}^{(4)}) q s \\ &\quad + \left[\frac{\hbar Q_{n0}}{m} \left(1 + \frac{1}{2} \tilde{\alpha}_{nn}^{(1)} \right) + \frac{Q_{n0}^2}{6} \tilde{\alpha}_{nn}^{(3)} + \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{\tilde{\alpha}_{nn}^{(1)}} \right) \tilde{v}_F^2 \right] q^2 \end{aligned} \quad (32)$$

下面我们称此为第一支层间耦合模式。

再令(31)式中子行列式等于零

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{pmatrix} = 0 \quad (33)$$

又可导得另外两支模式, 容易看出 Λ_{11} 与(30)式只相差如下的小项:

$$\sum_k (G_{n0}^{*k} + K_{n0}^{*k}) \frac{\hbar Q_{n0}}{2\tilde{N}_s} \left\{ \tilde{\alpha}_{nn}^{(1)} - \tilde{\mu}_{nn} q s + \frac{1}{6} \tilde{\alpha}_{nn}^{(3)} q^2 \right\}.$$

因此 $\Lambda_{11} = 0$ 是一支修正后的无重叠体模式。

$\Lambda_{22} = 0$ 则是纯由重叠效应引起的新模式, Λ_{12} 及 Λ_{21} 的作用是使这两支模式耦合而成另两支模式, 我们将其中与无重叠模式相近的一支称为修正的体模式, 另一支称为第二支层间耦合模式。原则上也可用解析法求解(33), 但计算较繁, 所以我们用数值法解出(33), 而求得了这两支模式。另外为了给出允许的激发可能存在带的宽度, 我们又直接从(29)式用数值法计算了 $k_s a = \pi$ 时各模式的 ω 随 qa 变化以及 $qa = 0.2$ 时各模式的 ω 随 $k_s a$ 变化的曲线。

数值计算中我们从 n-i-p-i 型超晶格为例选局域函数为谐振子波函数:

$$W_0(x) = \sqrt{\frac{4}{a\sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2}; \quad W_1(x) = \sqrt{\frac{8}{a\sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2} \cdot \xi;$$

其中 $\xi = ax$, $a = \frac{4}{a}$ (a 是超晶格层间距离), 所取的其它参数为:

$$\begin{aligned} N_s &= 1.22 \times 10^{11} \left[\frac{1}{\text{cm}^2} \right]; \quad v_F = 1.05 \times 10^7 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right]; \\ m &= 0.068m_0; \quad a = 2 \times 10^{-6} [\text{cm}]; \quad Q_{n0} = 3.14 \times 10^{13} \left[\frac{1}{\text{s}} \right] \\ V_0/\tilde{E}_F &= 0.1; \quad V_1 = 3V_0; \end{aligned}$$

由上述参数可算出

$$V_0 = 1.40 \text{meV}; \quad V_1 = 4.20 \text{meV}; \quad \tilde{v}_F = 1.34 \times 10^7 \left[\frac{\text{cm}}{\text{s}} \right]$$

以及各重叠积分的值 $\alpha_{nn}^{(1)} = 0.202$; $\alpha_{nn}^{(3)} = 0.133a^2$; $\mu_{nn} = 0.084a$; $\tilde{\alpha}_{nn}^{(1)} = 0.078$; $\tilde{\alpha}_{nn}^{(3)} = 0.113a^2$; $\tilde{\mu}_{nn} = 0.049a$; $\tilde{\alpha}_{nn}^{\pm(1)} = -\frac{0.00061}{0.096}$; $\tilde{\alpha}_{nn}^{\pm(3)} = -\frac{0.00027a^2}{0.164a^2}$

数值计算的结果分别在图 2、图 3、图 4 中绘出。

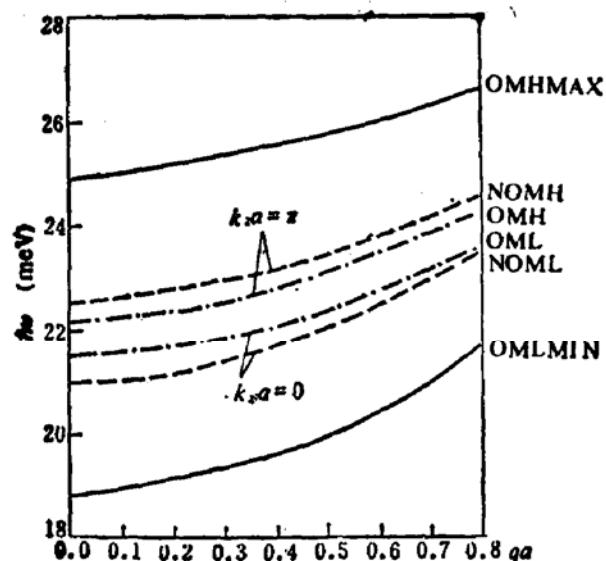


图 2 带间集体激发的能量 $\Delta\omega$ 随 qa 变化的曲线

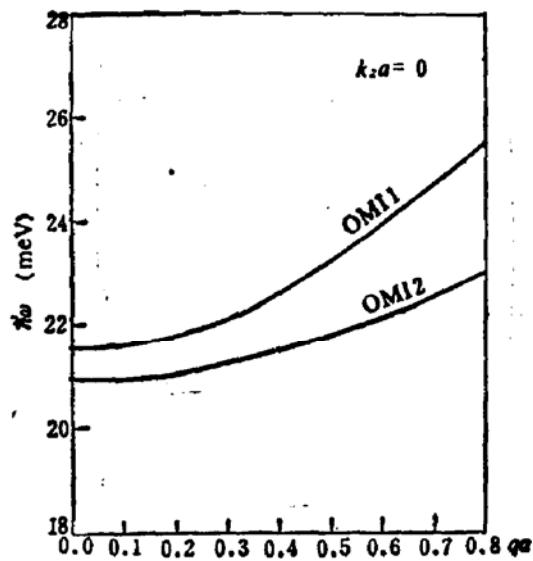


图 3 $k_z a = 0$ 时的第一支层间耦合模式 (OMI1) 及第二支层间耦合模式 (OMI2)

图 2 中画出了 $k_z a = 0$ 及 $k_z a = \pi$ 时的基——第一子带间激发的无重叠模式^[3] 及其修正后的形式。结果是 $k_z a = 0$ 时修正模式的频率高于无重叠模式，而当 $k_z a = \pi$ 时修正模式的频率低于无重叠模式。其物理意义是清晰的：当相邻层密度振荡的位相相同时 ($k_z a = 0$)，计入重叠使层间耦合加强因此恢复力增强使频率上移。相邻层位相相反时情形则相反。由于子带本身有一定宽度，所以实际激发存在带的宽度应是图上 OMLMAX 至 OMLMIN 两线间的区域。比无重叠带宽 (NOMH 与 NOML 两线间区域) 增宽甚多。

$k_z a = 0$ 时的第一及第二支层间耦合模式分别用 OMI1 及 OMI2 表示，在图 3 中绘出。其中由(32)式确定的 OMI1 支，对于基到第一子带的激发，由于 $W_n(z)$ 当 $n = 1$ 时是奇函数，因此(32)式中的 $\mu_{nn}^{(A)} = 0$ ，因此模式与结构因子 s 无关，这是在层与层界面上形成的类似于反型层带间模式的纯二维模式。由于不受结构引起的软化，这一支的频率比第二支高。当然如若讨论基和偶序数带间的激发，则 $\mu_{nn}^{(A)} \neq 0$ ，这时第一支也与 s 有关而将有显著的软化。第二支层间耦合模式频率最低，因为它是纯由层间波函数重叠引起的，其恢复力自然低于无重叠情形的恢复力。

最后，在图 4 中我们画出了 $qa = 0.2$ 时， ω 随 $k_z a$ 的变化，图中没有画出第一支层间耦合模式，因为如上所述 $\mu_{n1}^{(A)} = 0$ ，这一支模式与 $k_z a$ 无关，应是画上的一条水平线。

容易看出，对于非零宽度子带的带内激发，只要把上述计算中的 $\Omega_{n1} = \frac{E_n - E_0}{\hbar}$ 换成 $\Omega_{\infty} = \frac{E_{OH} - E_{OL}}{\hbar}$ (E_{OH} 和 E_{OL} 分别是基带内的某两个能量) 再把 $W_1(z)$ 换为 $W_0(z)$ ，则上述结果可以同样适用于带内非等能量的激发。

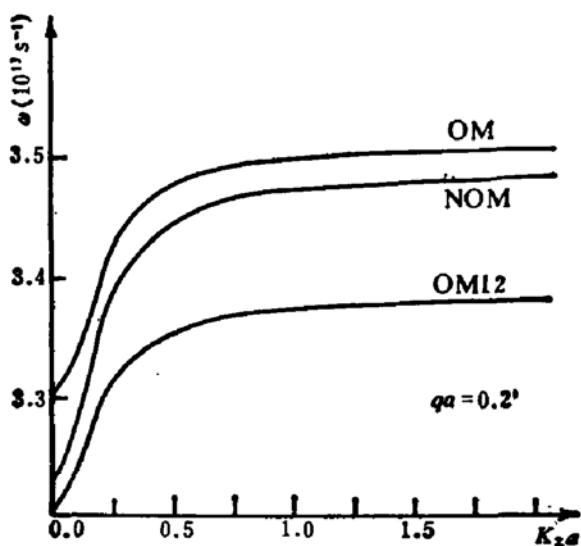


图4 $qa = 0.2$ 时，集体激发频率随 γ 方向无量纲波矢 $k_z\alpha$ 的变化曲线。
NOM 表示无重叠体模式，OM 表示修正后的体模式，OML2 表示第二支层间耦合模式。

如果把(1)式换成 $|n_s l, k, i\rangle = e^{iky} W_n(z - ja) u_l(x + l_H^2 k)$ (k 是 γ 方向动量, n 是子带指标, i_1 是层指标, l 是朗道能级指标, u_l 是谐振子波函数, l_H 是磁长)。则上述理论又可全盘套用于带间磁激发。

本文的研究是建立非平子带间光吸收理论及鞍点激子理论的基础。

参 考 文 献

- [1] Das Sarma and J. J. Quinn, *Phys. Rev.*, B25, 7603(1982).
- [2] Tselis A. and Quinn J. J., *Surface Sci.*, 113, 362(1982).
- [3] G. Gonzalez De La Cruz, A. Tselis and J. J. Quinn, *J. Phys. Chem. Solid*, 44, 812(1983).
- [4] A. Tselis and J. J. Quinn, *Phys. Rev.*, B29, 2021(1984). and *ibid* B29, 3318(1984).
- [5] P. Ruden and G. H. Dohler, *Phys. Rev.*, B27, 3547(1983). and *ibid*, B27, 3538(1983).
- [6] Jian Yang, Guoyi Qin and Changde Gong, unpublished.

Intersubband Collective Excitations in I-Type Semiconductor Superlattice

Guoyi Qin

(Department of Physics, Nanjing University)

Abstract

The self-consistent linear response theory and tight-binding approximation are used to calculate the intersubband collective excitations between non-flat subbands.

The results show that the non-overlapping mode obtained in reference [3] is obviously modified, two pieces of new modes come out as a result of the overlap between the wave functions of neighbour layers.

This method can be used to deal directly with the intrasubband excitations and magnet-plasmon excitations, thus paving the way for the establishment of an improved theory of intersubband optical absorption and the saddlepoint excitons in semiconductor superlattice.