

在深量子阱中的库仑杂质态

刘 振 鹏

(辽宁大学物理系)

1983年7月16日收到

对处于深量子阱中的库仑杂质态进行了变分计算,给出了基态束缚能作为量子阱厚度和杂质中心位置的函数。计算结果与 Bastard 的结果作了详细的比较。

一、引 言

近年来,由于分子束外延技术(MBE)和金属-有机物化学气相淀积技术(MO-CVD)的发展,使得有可能生长出极薄的高品质异质结,而由这种异质结所组成的周期性层状结构,其能带边沿随垂直于层平面的位置而周期性地变化,这种新的一维周期性结构被称为超晶格(S.L)^[1],其中由 GaAs-GaAlAs 所组成的层状结构形成多重量子阱(MQW)的能带结构是最简单的超晶格, GaAs 部分是势阱, GaAlAs 部分是阱壁势垒,由于这种结构具有与体 GaAs 很不相同的光学和输运特性^[2],使得人们对受限载流子和杂质态的研究有了新的兴趣。由于 GaAs 和 GaAlAs 材料的介电常数相近,前不久 Bastard^[3]在忽略镜像势和采用无限势垒模型的前提下,用变分法计算了 GaAs-GaAlAs 量子阱中的类氢杂质束缚能,虽然当阱厚 $L \rightarrow 0$ 和 ∞ 时其结果具有正确的极限,但就 Hilbert 子空间中的函数类来说,他所采用的变分波函数并不是最佳的。

本文利用前文^[4]所发展的变分法,计算了无限深势阱中类氢杂质的束缚能,对 Bastard 的结果有所改进。

二、无限深势阱中的库仑杂质态

考虑处在两平行平面 $z = \pm L/2$ 之间,由无限深排斥势垒 $V_{\text{conf}}(z)$ 所约束的类氢杂质原子。设电子坐标为 (x, y, z) , 杂质中心坐标为 $(0, 0, z_0)$, μ 为电子有效质量, κ 为介电常数。当长度单位采用有效 Bohr 半径 $a_0 = \kappa \hbar^2 / \mu e^2$, 能量单位用有效 Rydberg $e_0 = \mu e^4 / 2\kappa^2 \hbar^2$ 时,相应的有效质量哈密顿量可写成:

$$H = -\nabla^2 - 2[\rho^2 + (z - z_0)^2]^{-1/2} + V_{\text{conf}}(z) \quad (1)$$

其中 $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$, 则相应的波函数满足边界条件:

$$\psi(\pm L/2) = 0 \quad (2)$$

注意到满足边界条件的自由粒子的基态能量本征值为 $(\pi/L)^2$, 则束缚能由 $(\pi/L)^2$ 与由 (1), (2) 所对应的基态能之差确定。

为了求解(1), (2)所对应的 Schrödinger 方程, 我们采用如下形式的变分解:

$$\psi(r) = \begin{cases} Q(x) \exp\left(-\frac{1}{b}[\rho^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}\right) & |z| < \frac{L}{2} \\ 0 & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3)$$

其中 b 为变分参数. 利用^[4]的方法可得如下一维等效方程 ($|z| < \frac{L}{2}$):

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + V\right) Y(x) = EY(x) \quad (4)$$

$$V = -\left\{\frac{2b-1}{b(t+b/2)} + \frac{1}{4(t+b/2)^2}\right\} \quad (5)$$

其中 $Y(x) = \exp(-t/b)(1+2t/b)^{1/2} Q(x)$, 满足边界条件 $Y(\pm L/2) = 0$, $t = |z - z_0|$, $E = E(b, z_0)$, 是与参数 b 有关的基态能, 则束缚能由下式对 b 所取的极大值确定

$$E_B(b, z_0) = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 - E \quad (6)$$

如果 b_0 是使 $E_B(b, z_0)$ 取极值的 b , 则束缚能 $E_B = E_B(b_0, z_0)$ 是 z_0 和 L 的函数.

当 $L \rightarrow 0$ 时, (5) 中的 t 可忽略, 于是 V 是常数, (4), (5) 满足边界条件的解为:

$$Y(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi}{L} x\right) \quad (7)$$

则 $E_B(b, z_0) = \frac{4b-1}{b^2}$, 由 $\frac{\partial E_B(b, z_0)}{\partial b} = 0$ 得 $b_0 = 1/2$, $E_B = 4$, $\psi \propto e^{-2\rho}$, 与二维氢原子一致. 当 $L \rightarrow \infty$ 时, 问题化为单表面情形, 由 [4] 可知方程 (4), (5) 具有正确的解析解.

当 $L \approx 0$ 但不很大时, 可用 (7) 求等效哈密顿的期待值, 得到一个不同于 Bastard 的能量期待值的解析表达式:

$$\begin{aligned} E_B(b, z_0) &= \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos^2\left(\frac{\pi}{L} z\right) \left\{ \frac{2b-1}{b(t+b/2)} + \frac{1}{4(t+b/2)^2} \right\} dz \\ &= \frac{2b-1}{bL} \left\{ \ln \left[\frac{(b+L)^2 - 4z_0^2}{b^2} \right] + 2 \cos\left(\frac{2\pi}{L} z_0\right) g\left(\frac{\pi b}{L}\right) \right. \\ &\quad \left. + g\left(\frac{\pi}{L} A_+\right) + g\left(\frac{\pi}{L} A_-\right) \right\} + \frac{1}{L} \left\{ \frac{2 \cos^2\left(\frac{\pi}{L} z_0\right)}{b} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{2\pi}{L} z_0\right) f\left(\frac{\pi b}{L}\right) - \frac{\pi}{2L} \left[f\left(\frac{\pi}{L} A_+\right) + f\left(\frac{\pi}{L} A_-\right) \right] \right\} \quad (8) \end{aligned}$$

其中 $A_{\pm} = b + L \pm 2z_0$, 函数 f 和 g 的表达式为^[5]

$$f(p) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-pt}}{t^2+1} dt = Ci(p) \sin(p) - si(p) \cos(p) \quad (9)$$

$$g(p) = \int_0^{\infty} \frac{te^{-pt}}{t^2+1} dt = -Ci(p) \cos(p) - si(p) \sin(p) \quad (10)$$

其中积分正弦和积分余弦函数定义为:

$$\text{si}(p) = \text{si}(p) - \frac{\pi}{2} = \int_0^p \frac{\sin t}{t} dt - \frac{\pi}{2} \quad (11)$$

$$\text{Ci}(p) = r + \ln p + \int_0^p \frac{\cos t - 1}{t} dt \quad (12)$$

这里 $r = 0.57721 \dots$ 为 Euler 常数. 当 $p \rightarrow \infty$ 时函数 f 和 g 具有如下渐近行为^[5]:

$$f(p) \sim \frac{1}{p} \left(1 - \frac{2!}{p^2} + \frac{4!}{p^4} - \frac{6!}{p^6} + \dots \right) \quad (13)$$

$$g(p) \sim \frac{1}{p^2} \left(1 - \frac{3!}{p^2} + \frac{5!}{p^4} - \frac{7!}{p^6} + \dots \right) \quad (14)$$

当 $L < \frac{1}{4}$ 时, 利用 (13), (14) 代入 (8) 求对 b 的极值可得束缚能按 L 的展开式, 保留到 L 的一次幂为:

$$E_B = 4 \left\{ 1 - 2 \left[1 + \left(\frac{2z_0}{L} \right)^2 - \frac{4}{\pi^2} \cos^2 \left(\frac{\pi z_0}{L} \right) \right] L \right\} \quad (15)$$

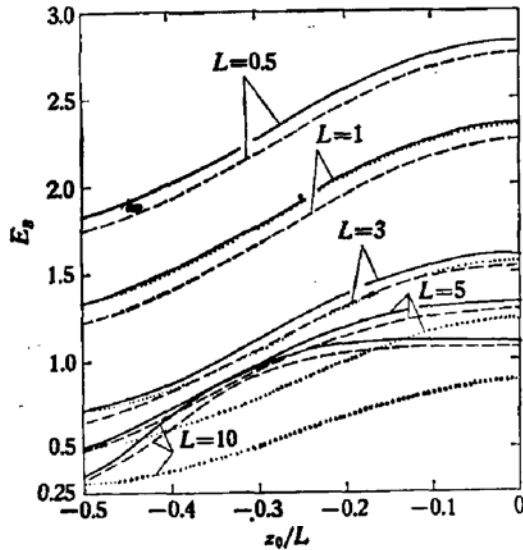


图1 E_B 和 z_0/L 的关系 实线表示(4)、(5)的数字解, 虚线是 Bastard 的结果, 点线是按公式(8)计算的结果, E_B 的单位是 $e_0 = \mu e^4 / 2\kappa^2 \hbar^2$

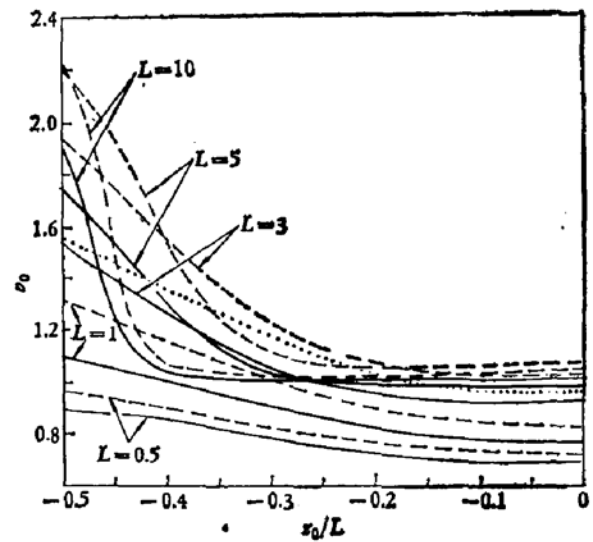


图2 b_0 和 z_0/L 的关系 实线表示(4)、(5)的数字解, 虚线是 Bastard 的结果, 点线是 $L=3$ 时公式(8)的结果. b_0 的单位是 $a_0 = \kappa \hbar^2 / \mu e^2$

数值计算的结果表示在图1和图2中, 其中图1表示 E_B 和 z_0/L 的关系, 图2表示“横向半径” b_0 与 z_0/L 的关系, 对 $L = 0.5, 1, 3, 5, 10$ 五种情形, 其中实线表示方程(4), (5)的数字解, 虚线是按 Bastard 文中(14)和(7)算得的结果, 点线是由公式(8)算得的结果, 由于图形对 $z_0 = 0$ 对称故只画出一半. 在图1中 $L = 0.5$ 时点线和实线的差别已不能在图中显示, 在图2中 $L = 0.5$ 和1时也有同样的情况, 且为了清楚起见删掉了 $L = 5$ 和10两条点线, 由图1可见, 在全部范围内数字解均优于 Bastard 的结果, 而由(8)所得结果在 $L < 3$ 的范围内优于 Bastard 的结果, 这对施主相当于 GaAs 层厚在 315 \AA 以下, 由于 L 小时空间限制效应较明显, 所以实际样品 GaAs 层多在 200 \AA 以内, 因此公式(8)是有用的, 对 Wannier 激子来说它是空穴的等效 Hartree 势, 用它来计算受限激子的束缚能. 由图2可见 Bastard 的受限杂质具有偏大的横向铺伸, 因此由它算得的从受主态 \rightarrow 第一导子带或施主态 \rightarrow 第一价子带的光吸收系数将略为偏大.

三、讨 论

对深量子阱中的库仑杂质态,我们作了比 Bastard 更精细的变分计算,对 $L = 1$ 来说基态束缚能相对于 Bastard 的结果约有 4% 的修正,而横向半径的修正则在 7.4% ($z_0 = 0$)—16.6% ($z_0 = 0.5$) 之间。

由于 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 异质结的能带跃变最多不超过几百 meV, 因此除非对 L 较大的情况,无限势垒模型不是好的近似^[6], 但如考虑电子自身镜像势的影响则又有利于这一模型^[7], 当然这必须认为阱壁极化能紧跟上电子的运动^[8]。从实验上看,激子吸收谱的二维特性支持无限势垒模型^[9], 而在垂直于阱壁的电场中带间复合发光的猝灭则有利于有限势垒模型^[10]。但不管是那一种模型都应尽量排除因计算不精确而带来的混淆。

总的看来,空间限制效应使杂质束缚能增加并消除了对空间位置的简并,另一方面使杂质半径减小,这使得有可能从测定重掺杂样品在低温下的导电率来观察 Mott 过渡,从而测得杂质横向半径,这也许是一种检验理论的实验方案。

参 考 文 献

- [1] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.*, **14**, 61 (1970).
- [2] B. A. Vojak et al., *Solid State Commun.*, **35**, 477 (1980).
- [3] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B24**, 4714 (1981).
- [4] 刘振鹏, *半导体学报*, **4**, 313(1983).
- [5] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, p. 232. 293 (1964).
- [6] C. Mailhot, Yia-chung Chang, and T. C. McGill, *Surf. Sci.*, **113**, 161 (1982).
- [7] A. D'Andrea and R. Del Sole, *Phys. Rev.*, **B25**, 3714 (1982).
- [8] Ю. И. Лозовик. В. Н. Нишанов. *ФТТ*, **18**, 3267(1976).
- [9] R. C. Miller, et al., *Phys. Rev.*, **B24** 1134 (1981).
- [10] E. E. Mendez, et al., *Phys. Rev.*, **B26** 7101 (1982).

Coulombic Impurity States in a Deep Quantum Well

Liu Zhenpeng

(Department of Physics, Liaoning University)

Abstract

A variational calculation of Coulombic impurity states in a deep quantum well has been performed. The binding energy of ground state is calculated as a function of the well thickness and of the impurity center position. The results are compared with Bastard's results in detail.