

# Schrödinger 方程的一般解与超晶格 多量子阱的电子跃迁

罗晓华<sup>†</sup>

(重庆交通大学图书馆, 重庆 400074)

(2013 年 8 月 30 日收到; 2013 年 10 月 6 日收到修改稿)

假设超晶格量子阱是一个形状任意的周期势阱, 电子在超晶格中的运动问题可视为周期场中的运动问题. 在量子力学的框架内, 从 Schrödinger 方程和它的一般解出发, 利用 Bloch 理论和传输矩阵方法导出了系统的色散方程; 在抛物线近似下, 讨论了超晶格量子阱的电子跃迁. 结果表明, 辐射能量位于红外、远红外或太赫兹波段.

**关键词:** 超晶格, 周期介质, 能级分裂, 电子跃迁**PACS:** 73.21.Cd, 03.65.-W, 02.10.Yn**DOI:** 10.7498/aps.63.017302

## 1 引言

注意到带电粒子同物质相互作用归根到底是同电磁场相互作用. 这就是说, 带电粒子同周期介质相互作用可视为同周期势场相互作用. 超晶格概念的提出及其半导体超晶格、量子阱材料的成功研制, 彻底改变了光电器件的设计思想. 20 世纪 80 年代以来, 能带工程就一直是半导体光电子器件的研究热点之一. 人们只需选择不同的阱宽、阱深、垒高、垒厚或引入应变等方式就可对量子阱材料的能带进行剪裁. 正是超晶格的特殊几何结构和光电性质引起了人们广泛兴趣<sup>[1-16]</sup>. 如果超晶格势垒层足够厚, 量子阱之间的相互作用可以忽略, 超晶格可视为单量子阱的周期重复, 而它的整体行为可视为单量子阱的线性叠加, 多量子阱问题退化为单量子阱问题. 如果势垒层比较薄, 量子阱之间的相互作用可以使能级分裂. 注意到认识总是近似的, 当初, 人们假设超晶格势垒层比较厚, 可用一个量子阱描述, 且假设量子阱是理想的方形势阱. 随着认识的深化, 先后出现了抛物线势阱、正切平方势阱、正割平方势阱以及非对称势阱等. 后来, 又注

意到大多数器件(比如超晶格量子阱器件)都不是一个势阱而是几个(比如两个或三个)势阱. 人们利用不同方法对这些器件的光电特征进行了研究. 本文试图在更一般情况下, 进行一次新的尝试, 并试图在特殊情况下回到原来结果. 基本思路是, 不管超晶格量子阱有多少个(原则上可以无限), 也不管量子阱的具体形状如何, 只需假设它们是周期的即可. 在量子力学框架内, 从 Schrödinger 方程和它的形式解出发, 利用 Bloch 理论和传输矩阵方法导出了系统一般的色散方程. 在局域抛物线近似下, 讨论了超晶格多量子阱的带内跃迁, 再现了过去的结果. 超晶格带内跃迁能量位于红外、远红外或太赫兹波段. 适当调整粒子(比如电子)能量或超晶格的阱深、周期就可以调节它的输出波长, 为超晶格在这个波段应用提供了一种广义描述.

## 2 运动方程与色散关系

### 2.1 Schrödinger 方程及其形式解

对于组分超晶格, 理想的量子阱是“方形”势阱. 但是, 由于生长过程中的任何一种因素(比如操作程序及生长条件, 材料组分及制备方法等)都可

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: luoshy@126.com

能使势阱偏离理想状态. 充分注意到超晶格是一个具有层状结构的周期介质, 不管超晶格量子阱的形状如何, 只需假设它是周期的即可. 于是, 电子在超晶格中的运动问题可化为图 1 所示的多量子阱中的运动问题. 在超晶格内部电子受周期场作用, 而外部将受到图 1 所示的势垒作用. 对于任意一维势阱, Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (1)$$

的解总可以形式上表示为<sup>[17]</sup>

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right), \quad (2a)$$

(垒区) 或

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right), \quad (2b)$$

(阱区) 其中

$$p = \sqrt{2\mu(E - V(x))} \quad (3)$$

是电子动量, 而  $\mu$  是电子有效质量,  $E$  是电子能量. 对于第  $n$  个势垒 ( $b_n < x < a_n$ ), 方程 (1) 的解可写为

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{C_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^x |p| dx\right) \\ &+ \frac{D_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^x |p| dx\right) \\ &= \frac{C_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx + \frac{1}{\hbar} \int_x^{a_{n+1}} |p| dx\right) \\ &+ \frac{D_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\hbar} \int_x^{a_{n+1}} |p| dx\right). \end{aligned} \quad (4)$$

将波函数 (4) 推广到第  $n+1$  个势垒, 可得

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{C_{n+1}}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx\right) \\ &+ \frac{D_{n+1}}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx\right), \end{aligned} \quad (5)$$

其中

$$\begin{aligned} C_{n+1} &= \frac{C_n}{2} e^{-\tau} \cos \sigma + D_n e^{\tau} \sin \sigma, \\ D_{n+1} &= -C_n e^{-\tau} \sin \sigma + 2D_n e^{\tau} \cos \sigma, \end{aligned} \quad (6)$$

而

$$\sigma = \frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} p dx = \frac{1}{\hbar} \int_{a_2}^{b_2} p dx = \cdots = \frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^{b_N} p dx, \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx = \frac{1}{\hbar} \int_{b_2}^{a_3} |p| dx = \cdots \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{b_{N-1}}^{a_N} |p| dx. \end{aligned} \quad (7b)$$

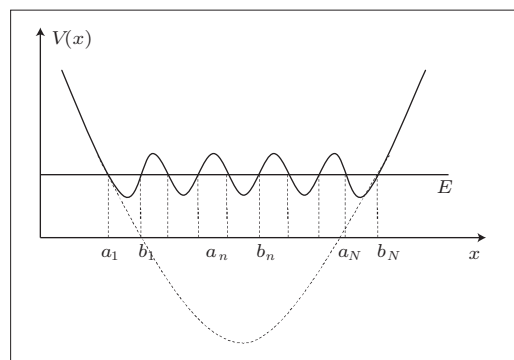


图 1 抛物线势与超晶格多量子阱示意图

## 2.2 转移矩阵与色散方程

将 (6) 式用矩阵表示为

$$\begin{pmatrix} C_{n+1} \\ D_{n+1} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix}, \quad (8)$$

其中

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (9)$$

是电子经过一个周期后波函数的传输矩阵, 而矩阵元分别为

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{1}{2} e^{-\tau} \cos \sigma; & a_{12} &= e^{\tau} \sin \sigma, \\ a_{21} &= -e^{-\tau} \sin \sigma; & a_{22} &= 2e^{\tau} \cos \sigma. \end{aligned} \quad (10)$$

经过  $N$  个周期的电子行为等效为用矩阵 (9) 对系统作用  $N$  次, 而  $C_N, D_N$  与  $C_0, D_0$  之间的关系可表示为

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C_N \\ D_N \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix} \\ &= A^N \begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

注意到在超晶格外 ( $x < a_1$  和  $x > b_N$ ) 势垒高度趋于无穷, 有理由假设  $C_0 = D_N = 0$ , 由此可导出  $(A^N)_{22}$  等于零.  $(A^N)_{22} = 0$  正是系统的色散方程, 它决定了系统的能量分布. 只需算出这个矩阵元,

系统的能级就决定. 为此引入矩阵

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = e^{At}, \quad (12)$$

其中  $A$  由 (9) 式给出, 并由此可得

$$\frac{dS}{dt} = AS, \quad (13)$$

而初始条件可表示为

$$S(0) = 1, \quad (14)$$

将 (13) 式展开

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (15)$$

或

$$\begin{aligned} \frac{dS_{11}}{dt} &= \alpha S_{11} + \beta S_{21}, \\ \frac{dS_{21}}{dt} &= \gamma S_{11} + \delta S_{21}; \\ \frac{dS_{12}}{dt} &= \alpha S_{12} + \beta S_{22}, \\ \frac{dS_{22}}{dt} &= \gamma S_{12} + \delta S_{22}. \end{aligned} \quad (16)$$

则可导出系统的色散方程

$$(A^N)_{22} = \left( \frac{d^N S_{22}}{dt^N} \right)_{t=0} = 0. \quad (17)$$

由 (17) 式可以看出, 系统的能级只与方程 (16) 的第二组方程有关.

借助变换  $S_{12} = fe^{\lambda t}$ ,  $S_{22} = ge^{\lambda t}$  引入两个新变数  $f$  和  $g$ , 由 (16) 式的第 3 式和第 4 式可得

$$\begin{aligned} f\lambda &= \alpha f + \beta g, \\ g\lambda &= \gamma f + \delta g, \end{aligned}$$

其中  $\lambda$  是矩阵

$$\begin{vmatrix} \alpha - \lambda & \beta \\ \gamma & \delta - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

的特征值, 由二次方程

$$\lambda^2 - \lambda \left( 2e^\tau + \frac{1}{2}e^{-\tau} \right) \cos \sigma + 1 = 0 \quad (18)$$

的根决定. 设方程 (18) 的两个根为  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$ , 由于  $\lambda_1 \lambda_2 = 1$ , 可将  $\lambda_1, \lambda_2$  表示为

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iu}, \quad (19)$$

其中  $u$  满足方程

$$\cos u = \left( e^\tau + \frac{1}{4}e^{-\tau} \right) \cos \sigma, \quad (20)$$

而满足初始条件  $S_{12}(0) = 0$  和  $S_{22}(0) = 1$  的解可以表示为

$$\begin{aligned} S_{12} &= \beta(e^{\lambda_1 t} - e^{\lambda_2 t}), \\ S_{22} &= \frac{(\lambda_1 - \alpha)e^{\lambda_1 t} - (\lambda_2 - \alpha)e^{\lambda_2 t}}{\lambda_1 - \lambda_2}. \end{aligned} \quad (21)$$

由 (17), (16) 和 (21) 式, 可得系统的色散方程

$$\begin{aligned} (A^N)_{22} &= \left( \frac{d^N S_{22}}{dt^N} \right)_{t=0} \\ &= \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} [(\lambda_1 - \alpha)\lambda_1^N - (\lambda_2 - \alpha)\lambda_2^N] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

将 (19) 式代入, 并注意到 (20) 式 (假设透射系数很小, 其中  $e^{-\tau}$  项可略去), 可得

$$\frac{\sin(N+1)u}{\sin u} = 0.$$

这个方程有如下形式的离散解:

$$u = \frac{n\pi}{N+1}, \quad (23)$$

其中  $u \neq 0, \pi$ . 于是 (20) 式可化为

$$\begin{aligned} \cos u &= \cos \frac{n\pi}{N+1} \approx e^\tau \cos \sigma, \\ (n &= 1, 2, \dots, N), \end{aligned} \quad (24)$$

且可具体地表示为

$$\begin{aligned} & \cos \left( \frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} p dx \right) \\ &= \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx \right) \cos \frac{n\pi}{N+1}, \\ (n &= 1, 2, \dots, N). \end{aligned} \quad (25)$$

方程 (25) 是一个超越方程, 不存在严格的解析解.

注意到  $e^{-\tau}$  是一个小量, 方程 (25) 可近似表示为

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} p dx &= \pi \left( m + \frac{1}{2} \right) \\ &+ \exp \left( -\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx \right) \cos \frac{n\pi}{N+1}, \\ (m &= 0, 1, 2, \dots); (n = 1, 2, \dots, N). \end{aligned}$$

用  $E_m^{(0)}$  表示单个势阱的能级, 可得

$$\frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} \sqrt{2\mu(E_m^{(0)} - V(x))} dx = \pi \left( m + \frac{1}{2} \right). \quad (26)$$

注意到系统的能量是量子化的, 可将 (3) 式中的能量  $E$  表示为  $E_m$ , 并将  $p = \sqrt{2\mu(E_m - V(x))}$  在

$E_m^{(0)}$  附近按能级间距  $\Delta E_m$  展开, 保留一次项, 再注意到 (26) 式, 可得

$$\begin{aligned} & \frac{\mu}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_m^{(0)} - V)}} \Delta E_m \\ &= \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx\right) \cos \frac{n\pi}{N+1} \\ & \quad (n = 1, 2, \dots, N). \end{aligned} \quad (27)$$

令

$$\frac{\pi}{\omega} = \mu \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{p} = \mu \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_m^{(0)} - V)}}, \quad (28)$$

其中  $\omega$  是单个势阱的粒子圆频率, 其大小只与势的具体形式有关. 由 (27) 式和 (28) 式, 可将能级间距表示为

$$\begin{aligned} \Delta E_m &= \frac{\hbar\omega}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx\right) \cos \frac{n\pi}{N+1}, \\ & \quad (n = 1, 2, \dots, N). \end{aligned} \quad (29)$$

一般情况下, (28), (29) 式中的积分需要数值计算. 注意到认识总是近似的, 不妨假设势阱和势垒都是抛物线的. 下面就在抛物线近似下做进一步析.

### 3 抛物线近似

#### 3.1 抛物线势阱

在抛物线近似下, 由 (28) 式, 粒子频率可表示为

$$\omega = \frac{\pi k d}{\sqrt{2\mu E} \arcsin \sqrt{\frac{k}{2E} d}}, \quad (30)$$

其中  $d = (a_n - b_{n-1})$  是势垒宽度,  $k = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right|_{x=0}$  是抛物线在  $x = 0$  处的二阶导数. 而抛物线势阱的粒子能量则可精确表示为

$$E_m^{(0)} = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega. \quad (31)$$

由于周期场影响, 多量子阱的粒子能量由公式

$$E_m = E_m^{(0)} + \Delta E_m \quad (32)$$

给出.

#### 3.2 抛物线势垒

从 (29) 式可以看出, 只要算出积分, 能级分裂问题就可以解决. 但是, 由于势的复杂性, 通常只能数值求解. 如果假设势垒也是抛物线的, 则可精确求出

$$-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx = -\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{V_0}} \frac{d(V_0 - E_m^{(0)})}{\hbar}, \quad (33)$$

其中  $V_0$  是势垒高度. 由抛物线势垒引起的能级分裂可以表示为

$$\begin{aligned} \Delta E_m &= \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp\left(-\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{V_0}} \frac{d(V_0 - E_m^{(0)})}{\hbar}\right) \\ & \quad \times \cos \frac{n\pi}{N+1}. \end{aligned} \quad (34)$$

上式表明, 抛物线能级分裂成带  $\Delta E_m$ , 每条能带包含  $N$  条子能级. 相邻子能级之间的距离  $\Delta E_m^n$  由公式

$$\begin{aligned} \Delta E_m^n &= |\Delta E_m^{n+1} - \Delta E_m^n| \\ &= \frac{\hbar\omega}{2(N+1)} \exp\left(-\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2\mu}{V_0}} \frac{d(V_0 - E_m^{(0)})}{\hbar}\right) \\ & \quad \times \sin \frac{n\pi}{N+1} \end{aligned} \quad (35)$$

给出. 上式表明, 当  $d$  和  $V_0 - E_m^{(0)}$  足够大时能级分裂可以不考虑. 但是对于量子阱来说, 这一项很重要, 特别是对于光学器件, 比如发光二极管, 半导体激光器等. 因为, 通常情况下, 量子阱的深度很浅, 大都在 eV 左右, 而能级分裂只有 meV 量级. 这就是说, 对于光学器件, 即使  $\Delta E_m^n$  很小对辐射能量都有贡献. 比如, 选择一组参数  $d = 4$  nm,  $V_0 = 10$  meV,  $V_0 - E = 4$  meV, 由 (35) 式可以求得能级间距

$$\Delta E_m^n = \frac{1.38}{N+1} \sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) \hbar\omega.$$

当  $N = 10$  时, 这条能带由 10 条子能级组成, 辐射能量如表 1 所示. 从表 1 可以看出, 能级分裂  $\Delta E_m^n$  是阱深 ( $\hbar\omega$ ) 的  $10^{-3}$  左右, 跃迁能量位于红外、远红外或太赫兹波段.

表 1 超晶格多量子阱带内跃迁能量, 单位  $10^{-3} \hbar\omega$  (eV)

| $n$            | 1     | 2    | 3    | 4    | 5    | 6    | 7    | 8    | 9    | 10   |
|----------------|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $\Delta E_m^n$ | 0.688 | 1.38 | 2.06 | 2.75 | 3.44 | 4.12 | 4.81 | 5.50 | 6.19 | 6.87 |

## 4 结 论

带电粒子在周期介质中的运动问题可以转化为周期势场中的运动问题. 鉴于超晶格是典型的周期介质, 电子在超晶格中的运动问题则视为周期势阱中的运动问题. 在量子力学的框架下, 从一般情况出发, 利用传输矩阵方法导出了系统的色散关系; 在抛物线近似下, 讨论了超晶格量子阱的电子跃迁. 结果表明, 由于周期场作用能级分裂成带, 子能级之间的距离是超晶格量子阱深度的 $10^{-3}$ 左右, 辐射能量位于红外、远红外或太赫兹波段.

## 参考文献

- [1] Gudixsen M S, Lauhon L J, Wang J F, Smith D C, Lieber C M 2002 *Nature* **415** 617
- [2] Urban J J, Talapin D V, Shevchenko E V, Kagan C R, Murray C B 2007 *Nature Materials* **6** 115
- [3] Miura K, Iguchi Y, Tsubokura M, Kawamura Y 2013 *Journal of Applied Physics* **113** 143506
- [4] Chen Y, Ouyang Z, Gu M, Cheng W L 2013 *Advanced Materials* **25** 80
- [5] Yakushiji K, Saruya T, Kubota H, Fukushima A 2010 *Applied Physics Letters* **97** 32508
- [6] Zhang M, Shao M Z, Luo S Y 2007 *Chin. J. Luminescence* **28** 679 (in Chinese)[张梅, 邵明珠, 罗诗裕 2007 发光学报 **28** 679]
- [7] Luo X H, He W, Wu M Y, Shao M Z, Luo S Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 064210
- [8] Liu H Z, Luo S Y, Shao M Z 2013 *Chin. Phys. B* **22** 047807
- [9] Luo S Y, Li H T, Wu M Y, Wang S J, Ling D X, Zhang W F, Shao M Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 15766 (in Chinese)[罗诗裕, 李洪涛, 吴木营, 王善进, 凌东雄, 张伟风, 邵明珠 2010 物理学报 **59** 15766]
- [10] Xu Z C, Chen J X, He L 2012 *Laser & Infrared* **42** 45 (in Chinese)[徐志成, 陈建新, 何力 2012 激光与红外 **42** 45]
- [11] Feng X Y, Lu Y, Jiang L, Zhang G L, Zhang C W, Wang P J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 057101 (in Chinese)[冯现祥, 逯瑶, 蒋雷, 张国莲, 张昌文, 王培吉 2012 物理学报 **61** 057101]
- [12] Li P P, Tang H B, She W L, 2012 *Acta Optica Sinica* **32** 0619004 (in Chinese)[李培培, 唐海波, 余卫龙 2012 光学学报 **32** 0619004]
- [13] Sun W F, 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 1171041 (in Chinese)[孙伟峰 2012 物理学报 **61** 1171041]
- [14] Xiao H J, Luo X H, Deng C L, Shao M Z 2011 *Seim. Optoelectronics* **31** 422 (in Chinese)[肖慧娟, 罗晓华, 邓成良, 罗诗裕, 邵明珠 2011 半导体光电 **31** 422]
- [15] Luo D Y, Shao M Z, Luo X H 2010 *Sci. Chin. (Physics, Mechanics & Astronomy)* **40** 207 (in Chinese)[罗诗裕, 邵明珠, 罗晓华 2010 中国科学(物理学, 力学和天文学) **40** 207]
- [16] Luo X H, He W, Shao M Z 2008 *High Power Laser and Particle Beams* **20** 675 (in Chinese)[罗晓华, 何为, 邵明珠 2008 强激光与粒子束 **20** 675]
- [17] Haar D T 1960 *Problems in Quantum Mechanics* (London: Infosearch Limited) p246

# General solution of Schrödinger equation and electron transition in superlattice multi-quantum well

Luo Xiao-Hua<sup>†</sup>

(Library, Chongqing Jiaotong University, Chongqing 400074, China)

( Received 30 August 2013; revised manuscript received 6 October 2013 )

## Abstract

Supposing that the quantum well of a superlattice is a periodic potential well of an arbitrary shape, the motion problem of electrons in the superlattice can be reduced into the motion in a periodic field. From the Schrödinger equation and its general solution, the dispersion equation of the system can be derived using Bloch theory and the transfer matrix method in the framework of quantum mechanics; and the electronic transitions of the multi-quantum well for the superlattice can be discussed in parabolic approximation. Results show that the radiation energy is located at the infrared, far infrared or terahertz band.

**Keywords:** superlattice, periodic media, energy splitting, electronic transition

**PACS:** 73.21.Cd, 03.65.-W, 02.10.Yn

**DOI:** [10.7498/aps.63.017302](https://doi.org/10.7498/aps.63.017302)

---

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [luoshy@126.com](mailto:luoshy@126.com)