

浅杂质势与窄量子阱的耦合作用

朱 嘉 麟

清华大学现代应用物理系

1988 年 10 月 13 日收到

本文采用一种新的变分波函数描述 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 窄量子阱中的浅施主基态,并计算了杂质基态波函数和结合能。计算所得数值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。

一、引 言

最近十几年来,在半导体材料、物理、器件研究的领域中,半导体超晶格和量子阱的研究十分活跃。迄今大量的研究集中在所谓的量子阱问题上。在超晶格中电子和空穴形成子带。当它们的运动受到量子阱的限制时,可表现出与很多物理性质有关的二维性。除著名的量子化霍尔效应与此密切相关外,量子阱中激子态和杂质态等的二维性从实验和理论上也已得到了证实^[1]。

众所周知,在 MOS 反型层或量子阱这样的准二维系统中,杂质对自由载流子的散射是低温下限制迁移率的重要机制^[2],所以从实验和理论上已广泛研究^[3]了考虑有限电子密度屏蔽的准二维系统的杂质态。当载流子和杂质浓度均很低时,已有很多人从理论上在忽略载流子屏蔽条件下,研究了超晶格量子阱中的单一浅杂质态。与此同时也引起了广泛的实验上的兴趣^[4]。

Bastard 最先研究了 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子阱中的单一浅杂质态^[5],他和后来的 Mailhot^[6], Wen-ming Liu^[7] 等人研究的是所谓的单阱问题,即认为势垒无穷厚,浅杂质仅受有限高的单一势阱的制约。1983 年,Chaudhuri 除研究处于单量子阱中心的杂质态外,还探讨了三阱中的浅杂质态,得到了一些非常有趣的结论^[8]。而在 1986 年,马德录、刘振鹏等人报道了受无穷多个周期性量子阱影响的浅杂质态^[9]。不论对有屏蔽还是无屏蔽的浅杂质态研究,大多数或计算结合能,或研究波函数等,除 Mailhot 用形式较为复杂的带变分参数波函数外,他们解决问题有一个共同的特点,即用超晶格方向受量子阱调制的类氢变分波函数描述量子阱中的浅杂质态。Bastard 等人指出阱宽小于 $3a^*$ (a^* 为有效玻尔半径)的条件下,用超晶格方向受调制的二维或三维类氢变分波函数,可以得到基本一致的结合能^[10,11]。我们的计算也证实了这一点,当势阱足够窄势垒足够高时,因受势垒的挤压,在超晶格方向(z 方向)电子云趋于密集。不仅库仑势在 z 方向对电子云的作用增强,而且不同于 x 或 y 方向,库仑势在 z 方向与量子阱的耦合作用随电子云受挤压加大增加得很快。由于电子云分布的微小变化局域较小范围,就会引起库仑势在 z 方向作用能较大的变化。所以再用仅被量子阱调制的二维或三维类氢变分波函数描述阱中

浅杂质态就不太合适。

正是鉴于上述变分波函数的缺陷,我们提出了一种新的变分波函数形式描述窄量子阱中的浅杂质态。这种波函数可反映在超晶格方向电子受库仑势和量子阱的联合作用这一事实,而在 xy 平面上形成一个受量子阱影响的二维类氢束缚态。基于这一新的变分波函数形式,在窄阱范围 ($0.2-2.5a^*$) 我们得到了优于 Chaudhuri^[8] 和 Wen-ming Liu^[7] 等人的计算结果。

二、模 型

为了突出问题的主要特点,也为了便于将我们的模型计算所得结果与已发表的有关结果进行比较,在不失模型一般性的条件下,作了一系列的简化。假设杂质处于势阱中心, GaAs 和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的介电常数及其电子的有效质量相等。对于势垒高且阱层较薄的情形,第一导子带的能量变得较大,此时 GaAs 导带的非抛物性的影响变得较为显著。我们的模型与其它模型一样,可以考虑非抛物性修正。但为了与已发表的结果比较,计算中不包括这一修正。在上述这些简化下,我们的具体模型如下: 设位于量子阱中心的浅杂质处于坐标原点,材料的介电常数和电子有效质量分别为 ϵ 和 m^* , 阱宽为 d , 势垒高度为 V_0 (V_0 可由 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 中的 x 而定), 这样描述方位阱中浅杂质态的有效哈密顿量为

$$\hat{H} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon[z^2 + y^2 + x^2]^{1/2}} & |z| \leq d/2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon[z^2 + y^2 + x^2]^{1/2}} + V_0 & |z| > d/2. \end{cases} \quad (1)$$

相应的定态薛定谔方程为

$$\hat{H}\phi = E\phi. \quad (2)$$

不难看出,由于库仑势的出现,使得我们无法得到方程(2)的解析解。正如引言中所述,较为普遍的解法是假设基态波函数为

$$\phi = N\phi_i \cdot \phi_e. \quad (3)$$

其中 N 为归一化常数, ϕ_i 为电子在一个无库仑势的有限深量子阱中运动的波函数。它在阱内为简单的三角函数,在阱外为指数函数。 ϕ_e 一般被表征为

$$\phi_e = e^{-[x^2+y^2+z^2]^{1/2}}/\lambda. \quad (4)$$

其中 λ 为变分参数。显然, ϕ_e 为类似于氢原子的基态波函数。

考虑到引言中所述变分波函数(3)式的不足,我们建立了适用于窄阱中浅杂质态的物理模型。在 xy 平面浅杂质为二维类氢原子,在 z 方向电子同时受量子阱以及依赖于量子阱的库仑势作用,而不是仅仅受量子阱的单一作用。为了得到符合所述物理图象的变分波函数,我们将(1)式表示的哈密顿量改写成

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma) + \hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma) \\ & - \hat{H}_z(\gamma) + \hat{H}_x(\alpha, \beta) + \hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma). \end{aligned} \quad (5)$$

其中

其中

$$\hat{H}_x(\gamma) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\gamma}{4\epsilon(x^2 + y^2)^{1/2}}, \quad (6)$$

$$\hat{H}_z(\alpha, \beta) = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{\beta e^2}{\epsilon(|z| + \alpha)} & |z| \leq d/2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{\beta e^2}{\epsilon(|z| + \alpha)} + V_0 & |z| > d/2. \end{cases} \quad (7)$$

我们取 $\hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma)$ 的基态波函数为变分波函数。

$$\phi(\alpha, \beta, \gamma) = N \phi_x(\gamma) \phi_z(\alpha, \beta). \quad (8)$$

其中 α, β, γ 均为变分参数。它们有明显的物理意义。受势阱影响作用于电子云的库仑势 $\frac{-e^2}{\epsilon\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$ 在 z 方向引起的作用为 $\frac{-\beta e^2}{\epsilon(|z| + \alpha)}$, α 起补偿根式中 $x^2 + y^2$ 部分的作用, 而 β 为 z 方向库仑作用的有效电荷数。 α 和 β 与电子云被压缩的程度密切相关, 即依赖于 V_0 和 d 。 γ 为调节二维类氢杂质有效玻尔半径的参数。 $\hat{H}_0$ 与原 (1) 式 $\hat{H}$ 的差由带参数 α, β, γ 的 $\hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma)$ 表示为

$$\begin{aligned} \hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma) &= \hat{H} - \hat{H}_x(\gamma) - \hat{H}_z(\alpha, \beta) \\ &= \frac{\beta e^2}{\epsilon(|z| + \alpha)} + \frac{\gamma e^2}{4\epsilon(x^2 + y^2)^{1/2}} - \frac{e^2}{\epsilon(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \end{aligned} \quad (9)$$

很明显, 浅杂质态的总能量为

$$\begin{aligned} E(\alpha, \beta, \gamma) &= E_0(\alpha, \beta, \gamma) + E'(\alpha, \beta, \gamma) \\ &= E_x(\gamma) + E_z(\alpha, \beta) + E'(\alpha, \beta, \gamma). \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $E_0(\alpha, \beta, \gamma)$ 为 $\hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma)$ 的基态能, 可以与波函数 $\phi(\alpha, \beta, \gamma)$ 一起精确算得。

$$\hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma) \phi(\alpha, \beta, \gamma) = E_0(\alpha, \beta, \gamma) \phi(\alpha, \beta, \gamma). \quad (11)$$

即

$$\hat{H}_x(\gamma) \phi_x(\gamma) = E_x(\gamma) \phi_x(\gamma), \quad (12)$$

$$\hat{H}_z(\alpha, \beta) \phi_z(\alpha, \beta) = E_z(\alpha, \beta) \phi_z(\alpha, \beta). \quad (13)$$

而 $E'(\alpha, \beta, \gamma)$ 由下式决定:

$$E'(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{\int \phi_x^* \phi_z^* \hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma) \phi_x \phi_z dV}{\int |\phi_x|^2 |\phi_z|^2 dV}. \quad (14)$$

值得指出的是, 我们可以用两种观点来看上述求解。一是借助于 (11) 式, 即 (12) 和 (13) 式, 求得变分波函数形式, 根据 $E(\alpha, \beta, \gamma)$ 取极小确定基态能和具体波函数形式的所谓变分法。另一是从微扰论观点来看, 将 $\hat{H}$ 分为两部分, 一为 $\hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma)$, 另一为微扰项 $\hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma)$ 。这里 $\hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma)$ 是一个可调的微扰项。我们取 $\hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma)$ 的基态波函数作为 $\hat{H}$ 的基态波函数, 而一级微扰能量修正为 (14) 式所示的 $E'(\alpha, \beta, \gamma)$ 。由微扰论可知从 $\hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma)$ 的本征解可得 $\hat{H}(\alpha, \beta, \gamma)$ 的波函数修正。在 $E_0(\alpha, \beta, \gamma)$ 与真实基态能较接近的条件下, 我们也可根据微扰能 $E'(\alpha, \beta, \gamma)$ 的大小大致判断所求基态波函数的好坏, 微扰能越小, 表示 $\hat{H}_0(\alpha, \beta, \gamma)$ 的基态 $\phi(\alpha, \beta, \gamma)$ 越接近 $\hat{H}$ 的真实基态波函数。至于 (3) 式所示

变分波函数不可能是某一 $\hat{H}_0(\lambda)$ 的精确基态波函数,也就无法写出 $\hat{H}'(\lambda)$,且根据 $E'(\lambda)$ 判断变分波函数的好坏。所以根据微扰能判断变分波函数好坏是我们这个方法所特有的。我们可以称具有上述特点的方法为变分微扰法,而称 $\hat{H}'(\alpha, \beta, \gamma)$ 为带变分参数的微扰项。求得杂质基态能 $E(\alpha, \beta, \gamma)$ 后,结合能就很易求得

$$E_B = E_0 - E. \quad (15)$$

其中 E_0 为量子阱的最低量子能级。

必须指出,这种变分波函数是为窄量子阱而设置的。当阱相当宽(例如大于 $3a^*$)时,仍可采用比较简单的调制三维类氢变分波函数。

三、计算方法

由模型中所述,我们要求解的单量子阱中单一浅杂质态,可归结为解附以一定边界条件和连接条件的如下几个方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\gamma e^2}{4\epsilon(x^2 + y^2)^{1/2}} \right] \phi_{xy} = E_{xy} \phi_{xy}, \quad (16)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{\beta e^2}{\epsilon(|z| + \alpha)} \right] \phi_z = E_z \phi_z, \quad 0 \leq z \leq d/2, \quad (17)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{\beta e^2}{\epsilon(|z| + \alpha)} + V_0 \right] \phi_z = E_z \phi_z, \quad z > d/2. \quad (18)$$

以及微扰能

$$E' = \frac{\int \phi_{xy}^* \phi_z^* \hat{H}' \phi_{xy} \phi_z dV}{\int |\phi_{xy}|^2 |\phi_z|^2 dV}. \quad (19)$$

下面分别叙述(16)–(19)各式的求解。

1. xy 方向的求解

参照文献[12],可得二维基态能为

$$E_{xy} = -2 \left(\frac{\gamma}{4} \right)^2 \frac{e^4 m^*}{\epsilon^2 \hbar^2}. \quad (20)$$

相应的基态波函数为

$$\phi_{xy} = N_{xy} \exp(-\gamma m^* e^2 (x^2 + y^2)^{1/2} / 2\epsilon \hbar^2). \quad (21)$$

其中 N_{xy} 为归一化常数。

2. z 方向的级数求解

按常微分方程级数解理论, $z=0$ 为方程(17)的常点,所以可设 $\phi_z = \sum_{n=0}^{\infty} A_n z^n$ 代入方程(17),经整理可得方程(17)的通解形式为

$$\phi_z = C_1 \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n + C_0 \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n. \quad (22)$$

其中 C_0 和 C_1 为任意常数, a_n 和 b_n 由如下递推关系式给出:

$$a_0 = 1, a_1 = 0, a_2 = -\frac{1}{2\alpha}(s + \alpha T),$$

$$a_n = -\frac{1}{n(n-1)\alpha} [(n-1)(n-2)a_{n-1} + (s + \alpha T)a_{n-2} + T a_{n-3}], \quad (23)$$

$$b_0 = 0, b_1 = 1, b_2 = 0.$$

$$b_n = -\frac{1}{n(n-1)\alpha} [(n-1)(n-2)b_{n-1} + (s + \alpha T)b_{n-2} + T b_{n-3}]. \quad (24)$$

其中 $s = \frac{2m^*}{\varepsilon} \beta$, $T = 2m^* E_z$.

$z = \infty$ 为方程(18)的非正则奇点, 具有常规解. 解的形式可取为^[13]

$$\phi_z = e^{kz} \sum_{n=0}^{\infty} g_n (z + R) \rho^{-n}. \quad (25)$$

其中 $k = -\sqrt{2m^*(V_0 - E_z)}$ 小于零, $\rho = \frac{\beta}{\varepsilon} \sqrt{\frac{m^*}{2(V_0 - E_z)}}$, R 为大于零的常数. 我

们把 ϕ_z 的展开式代入方程(18), 可得如下递推关系:

$$g_0 = 1, \quad g_1 = \frac{1}{2k} [\rho(\rho - 1) + 2Dk\rho],$$

$$g_n = \frac{1}{2nk} \{ [(\rho - n + 1)(\rho - n) + 2Dk(\rho - n + 1)] g_{n-1} + D(\rho - n + 2)(\rho - n + 1) g_{n-2} \}. \quad (26)$$

其中 $D = \alpha - R$, 在实际计算中, 我们按渐近展开理论^[14], (25)式中取有限项求和进行计算, 合理选取 R 可保证有限项求和在 $z = d/2$ 处的误差相当小.

至此可以将 z 方向的波函数表示为

$$\phi(z) = \begin{cases} C_1 \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n + C_0 \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n & 0 \leq z \leq d/2, \\ C_2 \sum_{n=0}^{\infty} g_n (z + R) \rho^{-n} e^{kz} & z > d/2. \end{cases} \quad (27)$$

在对称中心 $z = 0$ 处波函数的导数为零, 要求 $b_1 = 0$, 从而 $b_n = 0 (n = 2, 3, \dots)$. 在二区交界 $z = d/2$ 处, 波函数和其导数均应连续, 由此可得如下方程组:

$$A_{11}C_1 + A_{12}C_2 = 0,$$

$$A_{21}C_1 + A_{22}C_2 = 0. \quad (28)$$

其中

$$A_{11} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \left(\frac{d}{2}\right)^n,$$

$$\begin{aligned}
 A_{12} &= -e^{k(\frac{d}{2})} \sum_{n=0}^{\infty} g_n \left(\frac{d}{2} + R \right)^{\rho-n}, \\
 A_{21} &= \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \left(\frac{d}{2} \right)^{n-1}, \\
 A_{22} &= -e^{k(\frac{d}{2})} \sum_{n=0}^{\infty} \left(k + \frac{\rho-n}{d/2+R} \right) g_n \left(\frac{d}{2} + R \right)^{\rho-n}. \quad (29)
 \end{aligned}$$

显然,由方程组(28)有非零解条件,可确定基态能 $E_s(\alpha, \beta)$ 和 C_1, C_2 . 因而确定波函数 $\psi_s(\alpha, \beta)$.

3. 变分总能和微扰能

我们以部分解析和部分数值积分求得(14)式所示微扰能,这相当于用计算机完成一个对变量 z 的数值积分. 根据第二节中所述 α, β, γ 的物理意义以及结合能的变化范围,我们可以确定 α, β, γ 的变化范围. 首先将 α, β, γ 作成合理的、较粗的三维网格,然后根据(10)式所得的 $E(\alpha, \beta, \gamma)$ 逐步缩小区域使网格变细,以此数值地确定变分极值 $E_{\min}(\alpha, \beta, \gamma)$ 和相应的基态波函数. 应该指出,网格的取法对得到真正的变分极值影响是很小的. 在实际计算中,为防止因 $E'(\alpha, \beta, \gamma)$ 计算误差(例 10% 的相对误差)引起太大的 $E_{\min}(\alpha, \beta, \gamma)$ 计算误差,而得到偏离实际情况的 α, β, γ , 我们总是取 $E'(\alpha, \beta, \gamma)$ 的绝对值和 $E(\alpha, \beta, \gamma)$ 均较小的结果. 因一定相对误差下,小的 $|E'(\alpha, \beta, \gamma)|$ 的计算误差对 $E(\alpha, \beta, \gamma)$ 的影响是很小的. 在一定误差范围内,上述作法对合理的 $\psi(\alpha, \beta, \gamma)$ 形式,一方面可保证微扰成立,另一方面又满足变分能极小的要求.

4. 量子能级和结合能

令 $\beta = 0$, 仍解(17)和(18)式,可得最低量子能级 E_0 . 由(15)式得浅杂质的结合能.

四、计算结果与讨论

在计算中,我们使用原子单位,即长度单位为玻尔半径,能量单位取 Rydberg. 对 GaAs 有效玻尔半径 $a^* = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2} \approx 103.4 \text{ \AA}$, 有效 Rydberg $R^* = \frac{e^2}{2 \epsilon a^*} \approx 5.29 \text{ meV}$.

为与 Chaudhuri^[8] 和 Wen-ming Liu^[7] 的计算结果相比较,我们分别取垒高为 $76 R^*, 50 R^*, 30 R^*$ 和 $17 R^*$, 计算了不同阱宽下浅杂质的结合能,所得结合能随阱宽的变化曲线如图 1 和图 2 所示. 从图 1 和图 2 可以看出,我们计算的结合能(实线所示)在阱宽为 0.2 至 $2.5 a^*$ 的范围内,均比他们计算的结合能(虚线所示)大. 所有曲线在小 d 边均具有一个峰值,除峰值位置略有不同外,四组曲线峰值间的最大差别约为 0.1 至 $0.13 R^*$. 随着离峰值距离的增加,这种差别变小. 在 d 小于 $0.2 a^*$ 或大于 $2.5 a^*$ 时,我们计算的结合能开始低于他们计算的结合能, V_0 越小出现越早. 上述结果说明对 V_0 由 76 至 $17 R^*$ 以及 d 由 0.2 至 $2.5 a^*$ 范围内,用(8)式变分波函数优于他们的变分波函数,而当 d 小于 0.2

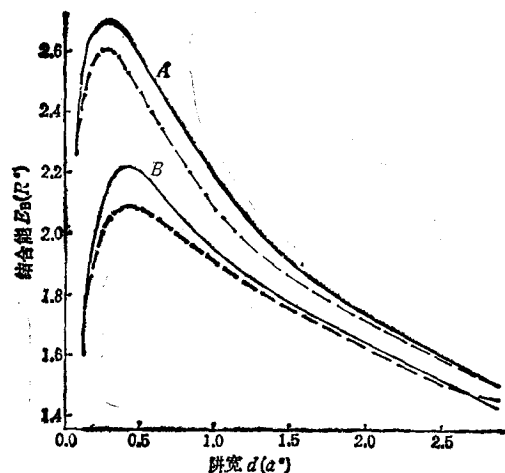


图 1 处于 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子阱中心的施主结合能与阱宽的关系 实线为本文结果; 虚线为 Chaudhuri 的结果; A 和 B 两组曲线分别表示垒高 V_0 取 $76R^*$ 和 $17R^*$ 时的情形

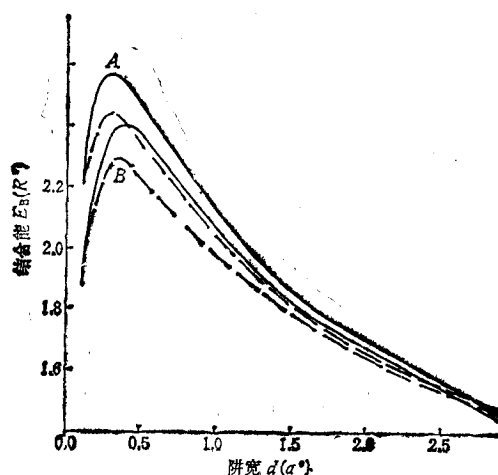


图 2 处于 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 量子阱中心的施主结合能与阱宽的关系 实线为本文结果; 虚线为 Wen-ming Liu 的结果; A 和 B 两组曲线分别表示垒高 V_0 取 $50R^*$ 和 $30R^*$ 时的情形

a^* 或大于 $2.5a^*$ 时, 即结合能减小时, 用量子阱调制的三维比二维类氢原子变分波函数描述更为合适。

Mailhiet 等人考虑了镜像电荷势和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 层与 GaAs 层有效质量不同的影响。采用由椭圆高斯型轨道线性组合表示的变分波函数, 在 $x = 0.1, 0.2, 0.3$ 和 0.4 情况下, 计算了结合能随阱宽的变化^[6]。按物理上分析, 由于附加的镜像吸引势以及 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 层有效质量增加的影响, 在相同 V_0 和 d 的条件下, Mailhiet 模型应该比 (1) 式有效哈密顿量得到更大的结合能。但将我们的计算结果折合到 $n = 0.1$ 和 $x = 0.2$ 两种影响因素较小的情况, 发现我们所得的结合能最大值 (2.27 和 $2.50R^*$) 大于他们所得的 (2.15 和 $2.42R^*$); 而在 $x = 0.3$ 时两者计算所得结合能的最大值恰好相等 (均为 $2.62R^*$); 在 $x = 0.4$ 时, Mailhiet 等人计算所得的最大结合能 ($2.81R^*$) 才大于我们所得的 ($2.72R^*$)。通过上述比较, 一方面说明考虑量子阱和杂质库仑势的耦合作用与上述两种影响因素同样重要; 另一方面说明我们所取的变分波函数在窄阱条件下优于 Mailhiet 等人的。

图 3 表示 V_0 为 $76R^*$ 时, 不同阱宽的 z 方向波函数分布。由图 3 可见阱宽 d 为 $0.125, 0.25$ 和 $0.5a^*$ 的波函数大部分局域于一个较小的区域。虽然阱宽为 $2.5a^*$ 的波函数主要局域于阱内, 但延展的范围比上述三种情形大得多, 电子云受 z 方向势垒的挤压变形较小, 仔细比较阱宽为前三种情形的 z 方向波函数, 我们可以看出是阱宽为 $0.25a^*$, 而不是 $0.125a^*$ 的 z 方向波函数在接近阱边处变化更大一些, 局域于更小的范围, 且相应地具有更大的结合能。很明显这是有限深势阱与无穷深阱的不同, 在无穷深阱情况下, 阱宽越小电子云被限制在越小的范围, 具有更大的结合能, 对有限深阱, 阱宽越窄, z 方向最低量子能级与垒高差越小 ($d = 0.125a^*, V_0 - E_z = 17.753; d = 0.25a^*, V_0 - E_z = 38.823$), 穿透几率越大, 所以电子云在局域范围的分布和结合能不仅依赖阱宽而且依赖于阱深, 这就是 V_0 为 $76R^*$ 阱宽为 $0.25a^*$ 的波函数反而比阱宽为 $0.125a^*$ 的波函数在阱边变化更

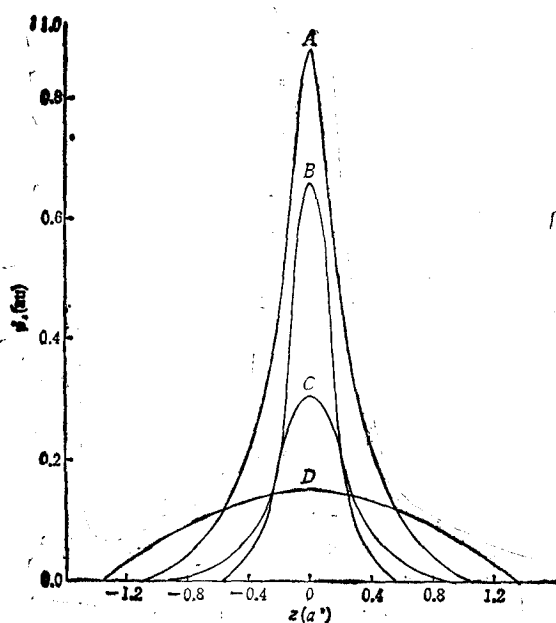


图3 垒高为 $76R^*$ 时,不同阱宽量子阱中杂质的基态波函数沿 z 方向的分布

曲线A为 $d = 0.125a^*$; 曲线B为 $d = 0.25a^*$;
曲线C为 $d = 0.50a^*$; 曲线D为 $d = 2.50a^*$

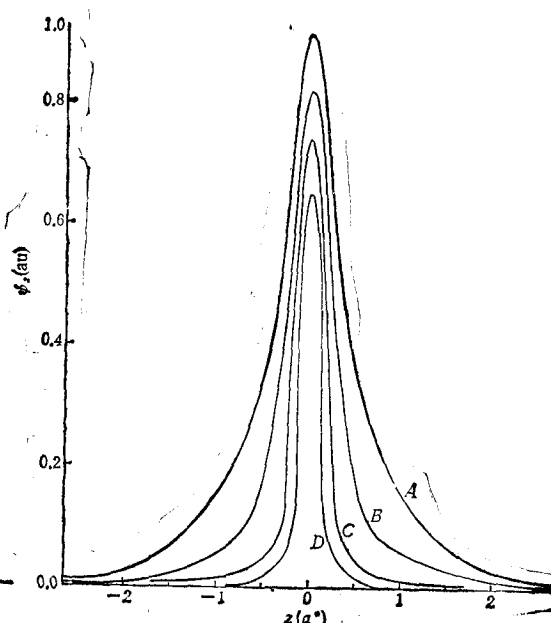


图4 阱宽为 $0.25a^*$ 时,不同垒高量子阱中杂质的基态波函数沿 z 方向的分布

曲线A为 $V_0 = 17R^*$; 曲线B为 $V_0 = 30R^*$;
曲线C为 $V_0 = 50R^*$; 曲线D为 $V_0 = 76R^*$

剧烈更局域,杂质态具有更大结合能的原因.这与上述有限深阱中浅杂质态在小 d 边结合能具有极大值相一致.图4表示阱宽为 $0.25a^*$ 时,不同阱深的 z 方向波函数分布.由图4可见随着阱深的增加电子云在 z 方向局域的范围减小,相应地具有的结合能增加.

表1 E_z 和 ΔE_z 与 V_0 , d 的关系 (单位为有效原子单位)

V_0		76	50	17
d				
0.125	E_z	58.247	41.121	15.207
	ΔE_z	1.383	1.080	0.755
0.25	E_z	37.177	28.576	12.344
	ΔE_z	1.462	1.427	1.286
2.5	E_z	0.630	0.668	0.589
	ΔE_z	0.695	0.665	0.515

表1所示数据为不同 V_0 和 d 值下, E_z 值及其与量子阱最低量子能级的差值 ΔE_z . ΔE_z 反映了 z 方向对结合能的贡献.从表1可以看出波函数在 z 方向越是局域,与其相应的 ΔE_z 就越大.

由对波函数和 z 方向结合能 ΔE_z 分析可知,结合能越大,电子云受挤压也越大,电子云主要集中的区域趋向于成为一个有限的短圆柱.在这一不大的区域内,库仑势与势阱

一起在 z 方向造成了电子云分布的剧烈变化, 能否正确描述 z 方向这一变化是能否得到正确 ΔE_z 和 E_z 的关键. (8) 式中的 $\phi_z(z)$ 可以正确反映这一变化, 所以得到了优于其他方法的结合能. 如果我们不考虑库仑势在势阱影响下对电子云的作用 (即取 $\beta \equiv 0$), 则我们所得的结果如引言中所述与 Chaudhuri 等人的结果差不多. 这恰好说明考虑库仑势与势阱在 z 方向的联合作用是处理好窄阱中浅杂质态较为重要的一步. 很明显, 在 d 较大时, 电子云受挤压变形并不严重, 库仑势对电子云的作用主要呈现球对称性, 用一个二维库仑势和一个受势阱影响并不大的 z 方向库仑作用来描述就会显得很不合适, 这就是导致 d 大时我们结果差的原因. 在 V_0 不大, d 太小时, 因穿透几率较大, 电子云主要呈现球对称性, 上述库仑势的分解办法同样不合适, 所以计算结果也差.

从整个单阱浅杂质态计算结果来看, 在 d 小于 $1.5a^*$, 结合能大于 $1.8R^*$ 时, 电子云较局域, 变分基态 $\phi(\alpha, \beta, r)$ 较接近真实波函数, 得到了比其他方法大的结合能. 此时的 $E'(\alpha, \beta, r)$ 较小, 小于结合能的 3%. 当结合能小于 $1.6R^*$ (在 V_0 较小时, 可以在小 d 边出现) 时, $\phi(\alpha, \beta, r)$ 与真实波函数的差别开始大起来, 结果劣于其他方法, 此时 $E'(\alpha, \beta, r)$ 大于结合能的 8%. 在 V_0 较大 d 较小时, 若取 $\beta \equiv 0$ 的变分解 $\phi(r)$, 则 $E'(r)$ 可相当大, 这说明 (19) 式所示微扰能的大小, 基本上反映了变分波函数的好坏.

至此我们从结合能、波函数和微扰能的分析, 可以得出如下结论: 高垒窄阱中的浅杂质态一方面呈现强二维性, 另一方面在 z 方向呈现强的库仑势和量子阱耦合作用. (8) 式所示变分波函数可对此作出合理的描述, 而对受势垒挤压并未造成电子云大大偏离球对称较宽量子阱中的浅杂质态, 可用 (3) 式所示变分波函数合理描述. 最后应该指出, 量子阱和库仑势在 z 方向的耦合概念, 同样可以用于窄阱中的激子态计算, 以得到更为合理的结果.

- [1] 黄昆, 物理, **15**(1985), 329.
- [2] For a Review, See T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.*, **54** (1982), 437.
- [3] P. Hawrylak and J. J. Quinn, *Phys. Rev.*, **B33** (1986), 8264 及其所引参考文献.
- [4] B. V. Shanabrook, J. Comas and T. A. Perry, *Phys. Rev.*, **B29** (1984), 7096.
- [5] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B24** (1981), 4714.
- [6] C. Mailhot, Y. C. Chang and T. C. McGill, *Phys. Rev.*, **B26** (1982), 4449.
- [7] Wen-ming Liu and J. J. Quinn, *Phys. Rev.*, **B31** (1985), 2348.
- [8] S. Chaudhuri, *Phys. Rev.*, **B28** (1983), 4480.
- [9] 马德录, 刘振鹏, 半导体学报, **7**(1986), 164.
- [10] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, *Phys. Rev.*, **B26** (1982), 1974.
- [11] J. A. Brum, G. Bastard and C. Guillemot, *Phys. Rev.*, **B30** (1984), 905.
- [12] B. Zaslav and M. E. Zandler, *Amer. J. Phys.*, **35** (1967), 1118.
- [13] 王作溪, 郭敦仁, 特殊函数概论, 科学出版社, (1965), 85 页.
- [14] 王作溪, 郭敦仁, 特殊函数概论, 科学出版社, (1965), 33 页.

COUPLING EFFECT BETWEEN A SHALLOW-IMPURITY POTENTIAL AND A NARROW QUANTUM-WELL

ZHU JIA-LIN

Department of Modern Applied Physics, Tsinghua University

(Received 13 October 1988)

ABSTRACT

Using a novel variational wave function for the ground state of the shallow donor in a narrow GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well, we have calculated the wave function and the binding energy for impurity ground state. The numerical results shown that it is important to describe the coupling between the narrow quantum-well and the impurity potential correctly.