

单带双谷超晶格理论

薛 舫 时

南京电子器件研究所
1988 年 10 月 27 日收到

本文提出了一种便于计算的 GaAs, AlAs 和 AlGaAs 的解析能带. 运用 LCAO 传输矩阵模型, 得到了传输特征值和能量有效质量. 由二能谷传输特征函数的研究, 导出了异质界面的谷间转换, 在此基础上提出了对称性变换器和对称性滤波器的新概念. 使用能量有效质量及界面谷间转换系数, 导出了单带双谷包络函数方程及其边界条件. 把这一理论应用于 GaAs/AlGaAs/AlAs 系统算出了超晶格量子阱的束缚能级与波函数, 并对这一广义有效质量理论的意义进行了讨论.

一、引 言

由各种异质界面构成的超晶格、量子阱已在各类器件中得到了广泛的应用, 但是其设计理论还不很完善. 它们的电子态要比均匀的半导体复杂得多. 许多作者使用赝势法、LCAO 法、LAPW 法、LMTO 法和 Wannier 轨道等方法对超晶格能带进行了研究. 由于在超晶格生长方向上原有的周期性势场遭到了破坏, 往往要选取很大的原胞, 使这些计算只能局限于一些薄层超晶格系统. Schulman 等人^[1]提出的传输矩阵方法避免了求解大原胞的困难, 为异质结研究提供了一种新方法. 然而这些能带方法的一个共同特点是用晶体的布洛赫函数来展开波函数. 当存在有外电场时, 晶格的平移对称性受到了破坏, 布洛赫函数不再是薛定谔方程的一个解. 特别在器件所用的电场下, 载流子同电场的相互作用能甚至比量子阱的束缚能量还大, 因而难以运用到实际器件设计中去.

有效质量包络函数是器件研究中的一种常用方法. 它给出了不少同实验相符的结果和简明的图像, 但还存在一些缺点. 例如当两种不同材料构成异质结时, 在界面处往往产生很大的能带交错. 这样处在一种材料带边附近的电子对另一种材料来说就处在远离带边甚至禁带之中了, 因而不能像均匀材料那样用一个带边的有效质量来描述电子的运动. 其次, 两种不同材料的导带底未必都在同一能谷中. 例如 GaAs 的导带底在 Γ 谷, AlAs 的导带底在 X 谷, 在它们所构成的超晶格量子阱中, 就可能产生 Γ 和 X 态的混和. 这样就必须考虑不同能谷的贡献.

为了克服这些缺点, 我们把有效质量理论推广到多能谷的情形. 把波函数分解成不同能谷的包络波函数之和. 这些包络波函数由各能谷的有效质量方程来求解, 它们将在异质结界面处产生一定的耦合. 有效质量不再被看作为带边能带的曲率, 而是给定能量下能带结构的一个参量. 使用能带方法可以算出各能谷的有效质量和界面上的谷间耦合系数. 这样就得到了一组多带多谷的广义有效质量方程. 对于 GaAs/AlAs 等宽禁带材

料系统,带间相互作用较小,只需考虑一个能带,这就是我们要讨论的单带双谷理论.

二、能带、传输矩阵特征值和有效质量

超晶格和量子阱的研究需要整个能带的信息,包括禁带中的衰减带.许多能带计算方法都只给出了 k 空间中某些点上的能量值,因而有必要寻求一种简便的描述整个能带的方法. Ting 等人^[2]在他们的单带 Wannier 轨道模型中,用 Wannier 轨道矩阵元 $\langle 0|H|R\rangle$ 来拟合赝势能带和实验值,得到的能带为

$$E(k) = \sum_R \exp(ik \cdot R) \langle 0|H|R\rangle. \quad (1)$$

式中 $|R\rangle$ 表示以格点 R 为中心的 Wannier 轨道,而 $\langle 0|$ 是指以原点为中心的 Wannier 轨道.对于 GaAs, AlAs 和 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 的最低一个导带用 21 个参数得到了较好的能带和有效质量数据.在超晶格和量子阱中,最重要的是超晶格生长方向上的运动,不妨用一个一维模型来简化计算.对 (100) 超晶格来说, (Γ, X) 方向上的能量公式 (1) 可以写成

$$E(k_x) = \langle 0|H|0\rangle + \sum_R 2\langle 0|H|R\rangle \cos(k_y R) \quad (2)$$

式中 $\langle 0|H|R\rangle$ 是一维的 Wannier 轨道矩阵元.用 (2) 式来拟合 (1) 式,发现只需用 6 个参数就能得到很好的结果.表 1 中列出了三种材料的能带参数,它们分别表示以价带顶为能量零点的最低一个导带,单位取 eV.这些数据已考虑了构成异质结时的能带交错. Goossen 等人^[3]最近指出能带交错随组份 x 增大而减小,因此我们已对 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 能带参数作了相应调整.对于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 合金可以像 Ting 等人那样对参数按 x^2 进行平均,从而得到相应的能带.

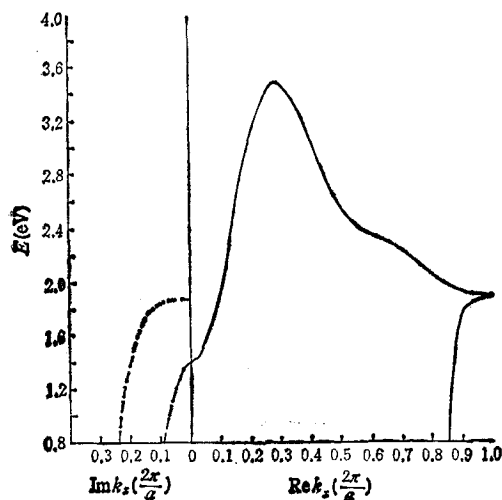


图 1 GaAs 的复能带图

就获得了一种用解析式来求复能带的简便方法而无需使用复杂的求 $|k\rangle$ 特征值的方法.

所求出的两个能谷的 k 值给出了两种波在一维格子中的传输特征值 $\exp(ik_R a)$ 和 $\exp(ik_X a)$.当能量高于能谷时,它表征布洛赫波在传输中的相位变化.而当能量低于对应

(2) 式还可以被用来计算一定能量下的 k 值.具体的解法是先用一个 $\cos(ka)$ 的 5 次多项式来拟合 (2) 式,其中 a 是晶格常数.然后解此 5 次方程求得 5 个 k 值.一般地说这些 k 值是复数.我们选取其中虚部最小即衰减最慢的两个根作为解.对 GaAs 而言,当能量分别小于 $E_\Gamma = 1.431\text{eV}$ 和 $E_X = 1.8998\text{eV}$ 时,这两个根分别对应于 Γ 和 X 谷的两个 k 值.当能量低于能谷时,所得的 Γ 点的 k 值是一纯虚数,而 X 点的 k 值是一复数.图 1 示出了按 (2) 式求得的 GaAs 的复能带.图中右边实线表示 k 的实部,左边虚线表示 k 的虚部.这样我们

表1 GaAs, AlAs 和 $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ 的能带参数

	GaAs	$\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$	AlAs
$\langle 0 \text{H} 0\rangle$	2.4336	2.4287	2.449
$2\langle 0 \text{H} 1\rangle$	0.3384	0.508	0.7
$2\langle 0 \text{H} 2\rangle$	-0.424	-0.283	-0.1434
$2\langle 0 \text{H} 3\rangle$	-0.4384	-0.3336	-0.2168
$2\langle 0 \text{H} 4\rangle$	-0.3442	-0.2816	-0.2206
$2\langle 0 \text{H} 5\rangle$	-0.1344	-0.1088	-0.0936

的能谷时, 虚部波矢给出了波随距离的增长或衰减因子. 我们也可用表1所列参数按传输矩阵方法来求传输特征值, 所得结果正好就是 $\exp(ik_r a)$ 和 $\exp(ik_x a)$.

使用这两个传输特征值, 可以容易地求出对应能谷的有效质量

$$m_r = \frac{\hbar^2 k_r^2}{2(E - E_r)},$$

$$m_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2(E - E_x)}. \quad (3)$$

式中 $\hbar$ 是普朗克常数, E_r , m_r 和 E_x , m_x 分别表示 Γ 和 X 谷的能量和有效质量. 这样求得的有效质量是能量 E 的函数, 我们称它为能量有效质量. Yang Qing 等人^[4]用半经验方法讨论了考虑能带非抛物线性和衰减带的有效质量, 而我们则从基本能带出发直接求出了这一能量有效质量.

三、异质结界面的谷间转换

前述两个传输特征函数之间是相互独立的, 因而在块纯半导体中两种波可以互不干扰地传输. 遇到异质界面时, 界面两侧各自具有不同的传输波, 从而诱发两种波之间的耦合. 例如当 GaAs 中的 Γ 波进入 AlAs 层时, 应该按 AlAs 中的 Γ 波和 X 波分解为

$$|\Gamma\rangle_{\text{GaAs}} \rightarrow C_{r\Gamma} |\Gamma\rangle_{\text{AlAs}} + C_{rx} |X\rangle_{\text{AlAs}},$$

同样对 X 波也可以分解为

$$|X\rangle_{\text{GaAs}} \rightarrow C_{xx} |X\rangle_{\text{AlAs}} + C_{xr} |\Gamma\rangle_{\text{AlAs}},$$

如果波从 AlAs 传输到 GaAs 中也存在对应的耦合系数 $D_{r\Gamma}$, D_{rx} , D_{xx} 和 D_{xr} , 这些耦合系数可以通过界面两侧的传输特征值来计算. 设 GaAs 中的两个传输特征值为 $\lambda_1 = \exp(ik_r a)$ 和 $\lambda_2 = \exp(ik_x a)$. 在一维模型中格点间波的传输可用传输矩阵写为

$$\begin{pmatrix} C_2 \\ C_1 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} C_1 \\ C_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_0 \end{pmatrix}$$

所以两种波的传输可由矩阵 $\begin{pmatrix} \lambda_1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix} \lambda_2 \\ 1 \end{pmatrix}$ 来描述. 设 AlAs 层中的传输特征值为 r_1 和 r_2 , 并且异质界面是一理想突变界面, 则界面两侧两种波的归一化传输矩阵应该在界面上匹配起来. 于是

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{\lambda_1^* \lambda_1 + 1}} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ 1 \end{pmatrix} &= C_{rr} \frac{1}{\sqrt{\gamma_1^* \gamma_1 + 1}} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ 1 \end{pmatrix} + C_{rx} \frac{1}{\sqrt{\gamma_1^* \gamma_2 + 1}} \begin{pmatrix} \gamma_2 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \frac{1}{\sqrt{\lambda_2^* \lambda_2 + 1}} \begin{pmatrix} \lambda_2 \\ 1 \end{pmatrix} &= C_{xr} \frac{1}{\sqrt{\gamma_1^* \gamma_1 + 1}} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ 1 \end{pmatrix} + C_{xx} \frac{1}{\sqrt{\gamma_2^* \gamma_2 + 1}} \begin{pmatrix} \gamma_2 \\ 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (4)$$

由 $\lambda_1, \lambda_2, \gamma_1$ 和 γ_2 可以求出 4 个系数 C_{rr}, C_{rx}, C_{xr} 和 C_{xx} . 这些系数都是复数, 其值依赖于界面两侧材料的能带结构, 并且随能量改变而变化. 同种能谷间的耦合系数 C_{rr}, C_{xx}, D_{rr} 和 D_{xx} 比较大, 具有近于 1 的实部. 不同谷的谷间耦合系数 C_{rx}, C_{xr}, D_{rx} 和 D_{xr} 一般要小一到两个数量级, 依赖于界面两侧材料间能带结构的差别. 例如 GaAs/AlAs 界面的谷间系数就比 GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As 界面大. 由此可以推测到突变异质界面上的谷间耦合系数要比缓变异质结大. Schulman^[6] 在组份渐变 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 界面的计算中指出, 当界面过渡区扩展到 4 个原子层时, 边界处的 X 波分量就消失了, 这同我们的结果相一致.

Osborn 等人曾经用 LCAO 方法计算过这种谷间耦合系数^[7], 计算过程比较复杂. Zohta 从正交性出发简单地算出了这一系数^[8], 其结果和我们的相近. 这种谷间耦合问题的研究给我们提出了这样一种启示: 异质结界面可以构成一种对称性变换器, 它能把某种对称性的输入波变换成另一种对称性的传输波. Mendez 等人在 AlAs/GaAs 异质结量子隧道电流的研究中已从实验上观察到这一现象^[9], Marsh 曾用赝势法计算过异质界面处 X 波的激发^[10], Schulman^[11] 的 LCAO 传输矩阵计算也讨论过这一问题. Liu 等人^[11,12] 提出用半经验的界面弹性 δ 散射势来处理这一问题. 我们则从能带传输特征波出发, 讨论了这一谷间耦合, 使它更直接地同异质结两边材料的能带结构联系起来.

四、单带双谷包络函数方程及其边界条件

在单带双谷模型中, 波函数由两个能谷的波函数来表征, 记为

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_r \\ \phi_x \end{pmatrix}. \quad (5)$$

薛定谔方程写为

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial X} \frac{1}{m_r(x)} \frac{\partial}{\partial X} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial X} \frac{1}{m_x(x)} \frac{\partial}{\partial X} \end{pmatrix} \phi + \begin{pmatrix} V_r(x) & 0 \\ 0 & V_x(x) \end{pmatrix} \phi = E\phi. \quad (6)$$

式中 $m_r(x)$ 和 $m_x(x)$ 分别表示 Γ 和 X 谷的有效质量. 它们既是能量的函数, 又可能随位置 x 而变, 如能带渐变材料等情形. $V_r(x)$ 和 $V_x(x)$ 是两个谷电子的势能, 它们依赖于外加电场、载流子空间电荷和各种材料间 Γ, X 谷的相对位置, 即能带交错.

考虑图 2 所示的由 A, B 两种材料组成的超晶格. 在 A 区和 B 区内波函数可以分别用 Γ 和 X 谷波函数展开为

$$\begin{aligned}\psi_A &= A_1\varphi_{r_1} + A_2\varphi_{x_1} \\ \psi_B &= B_1\varphi_{r_2} + B_2\varphi_{x_2}\end{aligned}\quad (7)$$

该结构对于势阱 A 和势垒 B 的中点 M, N 是对称的, 因而其波函数具有对称和反对称两种对称性。我们把 φ_{r_1} , φ_{r_2} , φ_{x_1} 和 φ_{x_2} 函数的原点取在中点 M 和 N 上。这样对于对称波函数 $\varphi(-x) = \varphi(x)$ 可以写出在异质结界面 P 点的波函数及其导数的连续方程

$$\begin{aligned}A_1\varphi_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rr} + A_2\varphi_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xr} &= B_1\varphi_{r_2}\left(\frac{W_B}{2}\right), \\ A_1\varphi'_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rr} + A_2\varphi'_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xr} &= -B_1\varphi'_{r_2}\left(\frac{W_B}{2}\right), \\ A_1\varphi_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rx} + A_2\varphi_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xx} &= B_2\varphi_{x_2}\left(\frac{W_B}{2}\right), \\ A_1\varphi'_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rx} + A_2\varphi'_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xx} &= -B_2\varphi'_{x_2}\left(\frac{W_B}{2}\right).\end{aligned}\quad (8)$$

考虑到超晶格的周期性, Q 点波函数与 O 点波函数间应具有关系

$$\psi_Q = e^{iq(W_A+W_B)}\psi_O \quad (9)$$

式中 q 是超晶格波矢。我们可以写出类似的边界方程。对 $q=0$ 状态可同方程(8)一起归并成

$$\begin{aligned}A_1\varphi_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rr} + A_2\varphi_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xr} - B_1P_1\varphi_{r_1}\left(\frac{W_B}{2}\right) \\ - B_2P_2\varphi_{x_2}\left(\frac{W_B}{2}\right) &= 0, \\ A_1\varphi'_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rr} + A_2\varphi'_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xr} + B_1P_1\varphi'_{r_1}\left(\frac{W_B}{2}\right) \\ + B_2P_2\varphi'_{x_2}\left(\frac{W_B}{2}\right) &= 0, \\ A_1\varphi_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rx} + A_2\varphi_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xx} - B_1Q_1\varphi_{r_1}\left(\frac{W_B}{2}\right) \\ - B_2Q_2\varphi_{x_2}\left(\frac{W_B}{2}\right) &= 0, \\ A_1\varphi'_{r_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{rx} + A_2\varphi'_{x_1}\left(\frac{W_A}{2}\right)C_{xx} + B_1Q_1\varphi'_{r_1}\left(\frac{W_B}{2}\right) \\ + B_2Q_2\varphi'_{x_2}\left(\frac{W_B}{2}\right) &= 0.\end{aligned}\quad (10)$$

式中

$$\begin{aligned}P_1 &= \frac{1 + D_{rr}C_{rr} + D_{rx}C_{xr}}{2}, & P_2 &= \frac{D_{xr}C_{rr} + D_{xx}C_{xr}}{2}; \\ Q_1 &= \frac{D_{rr}C_{rx} + D_{rx}C_{xx}}{2}, & Q_2 &= \frac{1 + D_{xr}C_{rx} + D_{xx}C_{xx}}{2}.\end{aligned}\quad (11)$$

这是一组线性齐次方程, 由系数行列式等于零的条件可以确定出其能级和波函数。对于反对称波函数可以得到同样的方程, 只是所用的 φ_r 和 φ_x 函数需改用反对称波函数。在

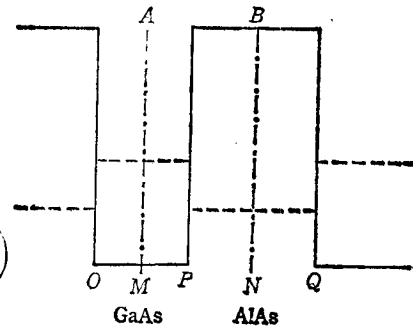


图2 GaAs/AlAs 系统的 Γ 和 π 量子阱结构简图

上面的推导中使用了简单的波函数微商连续条件。一般考虑到界面电流连续条件,经常使用的波函数微商匹配条件为

$$\frac{1}{M_A^*} \frac{\partial \psi_A(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_0^-} = \frac{1}{m_B^*} \frac{\partial \psi_B(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_0^+} \quad (12)$$

对于电场均匀的非能带渐变材料,方程(6)可以用 Airy 函数来求解。但是在 X 势垒中, k 是一个复数,使得方程(10)的系数行列式变成复数。要改变一个实数的能量 E 来使复数行列式变成零是十分困难的,因而我们宁可使用微分方程数值解的方法来求 φ_r 和 φ_x 。使用数值解的另一好处是可适用于任意的电场分布和依赖于位置的能带,而且还能用来求得自洽解。

五、GaAs/Al_xGa_{1-x}As 系统束缚能级的计算

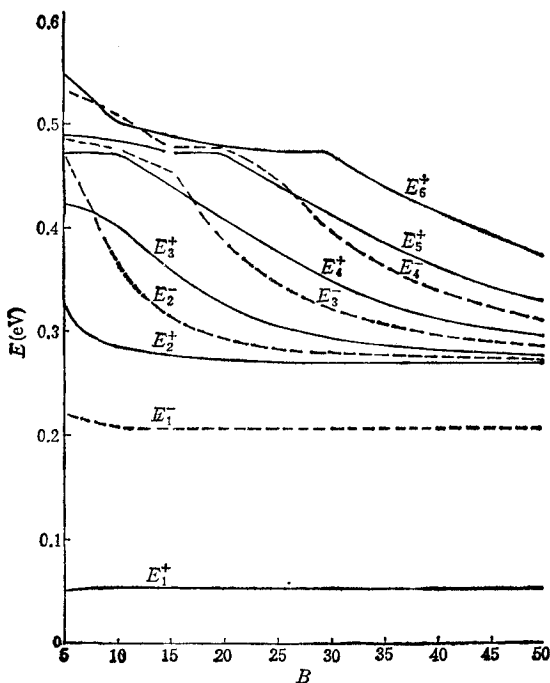


图3 $W = 30$ 的 GaAs/AlAs 阱束缚能级 E 同 B 的关系

层中, AlAs 构成高达 1.05eV 的势垒。虚线所示的 X 阱在 AlAs 层中, 其阱底比 Γ 阱底高 0.25eV, 而在 GaAs 层中的 X 势垒仅高 0.205eV。这两个阱的结合给该系统带来了许多有趣的特性。

设 GaAs, AlAs 层厚分别为 W, B , 均以分子层为单位。用匹配条件(12)式计算了束缚能级, 图3示出了 $W = 30$ 的 GaAs/AlAs 阱束缚能级 E 同 B 的关系。实线和虚线分别表示对称和反对称能级 E_n^+, E_n^- 。能级大致可分为两类, 一类不随 B 而变, 如 E_1^+ 。这些都是 Γ 态, B 是其势垒宽度而同能级无关。另一类能级如 E_2^+, E_3^+ 等属于 X 态, 能级随阱宽 B 的减小而升高。有些能级发生交错, 如 E_2^+ 在 $B < 20$ 时是一 Γ 态, 而当 $B > 20$ 时转变成一个 X 态, 说明此处产生了 Γ -X 混和。

图2中实线所示的 Γ 阱位于 GaAs

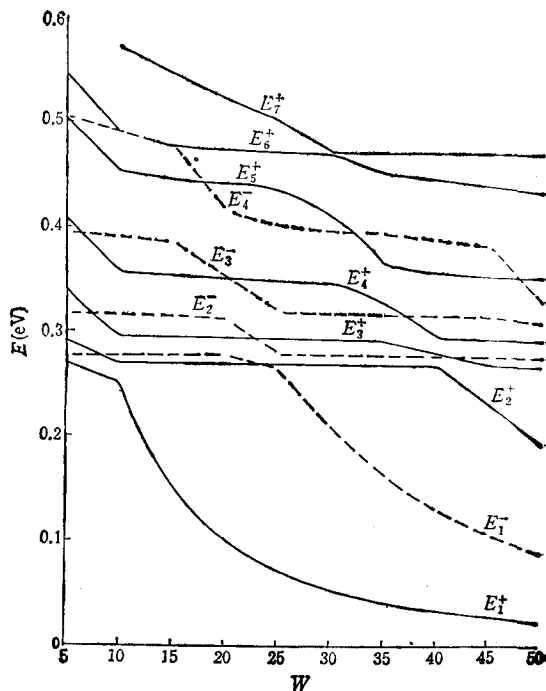


图4 $B = 30$ 的 GaAs/AlAs 阱中能级 E 同 W 的关系

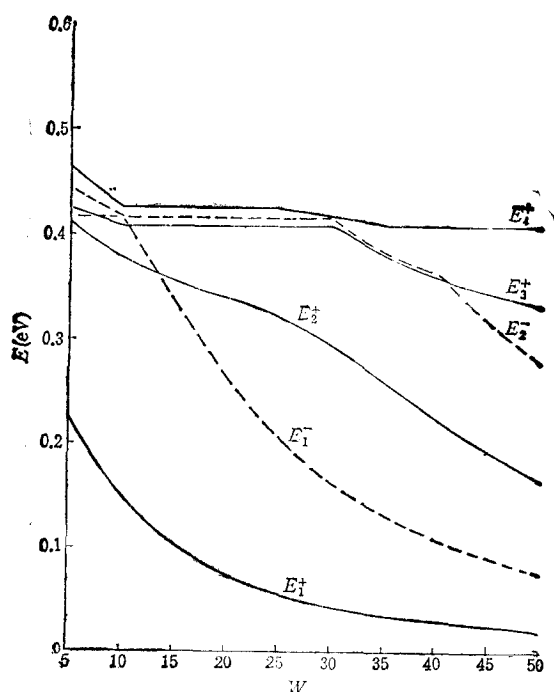


图 5 $B=30$ 的 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 阱中能级 E 同 W 的关系

图 4 示出了 $B=30$ 的 GaAs/AlAs 阱同 W 间的关系。同图 3 相反较低的 Γ 态能级随 W 减小而迅速升高, 较高的 X 态能级则不随 W 而变。同样在许多曲线中出现了转折, 说明 Γ - X 混合效应。图 5 示出了 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 阱中的能级。同 GaAs/AlAs 阱相比, Γ 势垒降低而 X 阱底升高, 使 Γ 态能级下降而 X 能级上升。在 0.4eV 能量以下没有 X 能级和 Γ - X 混和。这样在此能量范围内其能级同一般有效质量理论一致。

六、讨 论

在异质结构中, 电子能量可以离带边很远, 甚至处于禁带之中, 必须使用整个能带的信息来描述其特性。本文所引入的一维能带模型给出了一种简便的计算方法。用它可以容易地求得精确的一维能带, 给定能量下的传输特征值以及能量有效质量等参量。Brey 等人^[3]也使用过一维的 LCAO 模型来描述量子阱中的隧道电流, 但是他们仅考虑了次近邻的相互作用, 不能算得适当的 GaAs 和 AlAs 的能带而获得可靠的结果。

有效质量理论模型简单, 使用方便, 多年来一直被广泛地用于器件物理研究中。Marsh 和 Inkson^[4]用赝势法研究了有效质量理论的可靠性。他们的结果只适用于低 x 组份的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 合金材料。在那种情况下, Γ 阱的势垒高度比 X 阱底来得低。对于势阱中的束缚能级, X 态都是衰减解, 没有显著的 X 分波。当 x 组份升高时, Γ 阱势垒变得很高, 远高于 X 阱底和 X 阱势垒, X 谷的贡献就不容忽略, 上节的结果充分说明了这一点。

单带双谷理论把半导体能带研究同异质结物理直接联系了起来。要获得同实验精确

相符的结果就必须求得精确的能带。这同时也为能带研究创造了条件。现有的 MBE 和 MOCVD 工艺已发展到可以控制单原子层的生长。制作各种不同势垒高度和宽度的量子阱,从光谱实验中可以获得不同能量下的能量有效质量,从而得到丰富的实验能带信息。一般体材料的实验能带研究往往只能获得一些临界点上的结果,因而通过量子阱的研究可望提高体能带的精度。

异质结量子阱所诱生的不同能谷间的转换特性是一个有趣的新课题。使用对称性变换器和对称性滤波器可以设计出种种载流子对称性可控的器件来。这些工作应该被看成是异质结研究中的一个新的应用领域。

本文是作者在英国 GEC 公司 Hirst 研究中心工作时完成的。作者对 B. Movaghar 和 N. Cade 教授的鼓励和有益的讨论深表感谢。

- [1] J. N. Schulman and Yia-Chung Chang, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 2346.
- [2] D. Z.-Y. Ting and Yia-Chung Chang, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 4359.
- [3] K. W. Goossen, S. A. Lyon and K. Alavi, *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 9370.
- [4] A. C. Marsh and J. C. Inkson, *IEEE J. Quantum Electronics*, **QE-22**(1986), 58.
- [5] Yang Qing and Yang Chu-ling, *J. Phys. C*, **20**(1987), 5125.
- [6] J. N. Schulman, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B1**(1983), 644.
- [7] G. C. Osbourn and D. L. Smith, *Phys. Rev.*, **B19**(1979), 2124.
- [8] Y. Zohta, *Jap. J. Appl. Phys.*, **27**(1988), L906.
- [9] E. E. Mendez *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **50**(1987), 1263.
- [10] A. C. Marsh, *Semicon. Sci. Technol.*, **1**(1986), 320.
- [11] H. C. Liu, *Appl. Phys. Lett.*, **51**(1987), 1019.
- [12] Xue Fangshi, *Semicon. Sci. Technol.*, 待发表.
- [13] L. Brey and C. Tejedor, *Solid State Commun.*, **61**(1987), 573.

A SINGLE BAND-DOUBLE VALLEY THEORY FOR SUPERLATTICE AND QUANTUM WELL

XUE FANG-SHI

Nanjing Institute of Electronic Devices Research
(Received 27 October 1988)

ABSTRACT

In this paper, an analytical energy band easy to calculate for GaAs, AlAs and AlGaAs is proposed. The transfer eigenvalue and energy effective mass are obtained by using the LCAO transfer matrix model. By studying the transfer eigenfunction for two energy valleys, the transformation between different energy valleys is derived, from which new concepts about symmetry transformer and symmetry filter are suggested. Using the energy effective masses and the transformation coefficients between energy valleys at the interface, we derive the equations of envelope function and their boundary conditions for this single band-double valley model. Applying this theory to GaAs/AlGaAs/AlAs system, the confined energy level and wavefunction are calculated. Finally, the significance of this generalized effective mass theory is discussed.