

适于超晶格应用的 Kronig-Penney 模型新形式

潘少华 冯思民 杨国桢¹⁾

中国科学院物理研究所, 北京 100080

1989年10月26日收到

本文发展了一种 Kronig-Penney 模型的新形式, 比文献[1]的新形式更加普遍和实用, 可以分别给出奇数带和偶数带任意 k 值的包络波函数和能量本征值, 并且深入分析了波函数的宇称, 从而为对超晶格物理性质的研究, 提供了一种更加合适的理论形式。

PACC: 7340L; 7125T

一、引 言

随着分子束外延等技术的不断完善, 半导体多量子阱结构 (MQWS) 和超晶格的制备、研究和应用受到日益广泛的重视。MQWS 和超晶格都是由两种材料薄层交替生长而成, 由窄带隙材料构成电子和空穴的势阱, 而由宽带隙材料构成势垒, 它们的层厚分别用 a 和 b 表示, 图 1 给出电子的势能曲线。

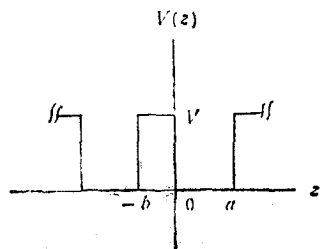


图 1 超晶格的周期方势阱 a 和 b 分别为阱和垒宽; 超晶格周期为 $d = a + b$; V 为垒高

MQWS 和超晶格的区分, 是根据垒宽 b 与波函数穿透深度 δ^{-1} (δ 的定义见以下(2)式) 的相对大小: 当 $b \gg \delta^{-1}$ 即 $\delta b \gg 1$ 时, 称为多量子阱, 虽然它也具有周期性的多层结构, 但由于势阱间的穿透可以忽略, 其绝大多数物理性质等同于一组独立阱, 且与单阱并无根本差异; 相反地, 当 $b < \delta^{-1}$, 即 $\delta b < 1$ 时, 称为超晶格, 由于阱间波函数交迭, 电子不再是定域的, 势阱间的相互作用使系统的物理性质发生重大变化。本文以其最基本物理性质, 即能级和波函数的变化为分析对象。

正如 Esaki 所说^[2], 超晶格势接近于 Kronig-Penney 模型^[3]。但考虑到电子有效质量 m^* 在阱内和垒上有不同值, 关于波函数 ϕ 及其导数的边界条件应作相应的改变。目前文献上(包括本文)所乐于采用的是 Bastard 边界条件^[4]: 在势阱与势垒的交界面(例如图 1 $z = 0$), ϕ 以及 $(1/m^*)(\partial\phi/\partial z)$ 连续。它反映在交界处电子概率和概率流守恒。

近来, Cho 和 Prucnal 给出适用于超晶格的 Kronig-Penney 模型的一种新形式^[5], 可以计算对应于能带边 ($kd = n\pi$) 的波函数 (k 为波矢, $d = a + b$ 为超晶格周期), 因而比前人有所前进, 因为以前只得到能带方程, 未曾得到带边波函数。本文将推导出 kd

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)。

为任意值的波函数解析形式 $\psi(k)$, 进而阐明波函数的宇称对 k 值以及材料参数的依从性, 因此比文献[1]的理论关系式更加普遍和深刻, 从而更适用于对超晶格物理性质 (例如非线性光学性质) 的分析和应用器件 (例如红外探测器) 的设计。

二、奇数和偶数子能带方程

超晶格周期 d 的典型值为 100 \AA , 它为体材料晶格常数 l_z (约 5 \AA) 的 $n (=d/l_z)$ 倍, 使布里渊区缩小成体材料的 $1/n$, 成为微布里渊区, 使能带分成 n 个子带 (subband)。电子态波函数可看成是原子晶格布洛赫波函数 (周期为 l_z) 和由超周期势阱而来的包络波函数 ψ 之乘积。用 Kronig-Penney 模型代表超晶格势, 从薛定谔方程之解, 给出 ψ 如下:

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_0^+ \cos(\alpha z) + \psi_0^+ \frac{1}{\alpha} \sin(\alpha z) & 0 \leq z \leq a; \\ \psi_0^- \text{ch}(\delta z) + \psi_0^- \frac{1}{\delta} \text{sh}(\delta z) & -b \leq z \leq 0. \end{cases} \quad (1)$$

上式用了简化符号: $\psi_0^\pm \equiv \psi(z)|_{z=\pm 0}$, $\psi_0^\pm \equiv \frac{d\psi(z)}{dz}|_{z=\pm 0}$, 式中 α 和 δ 分别由下式定义:

$$\alpha = \frac{1}{\hbar} (2m_a E)^{1/2}, \quad \delta = \frac{1}{\hbar} [2m_b (V - E)]^{1/2}, \quad (2)$$

式中 m_a 和 m_b 分别为阱内和垒上电子有效质量。根据同光波的类比, δ 的倒数 $1/\delta$ 可称为穿透深度。(2)式 E 为电子能量。为简单起见, 本文只限于讨论 $E < V$ 的情形, 其结果不难推广至 $E > V$ 的情形。 $-b \leq z \leq a$ 区域以外的 ψ 由(1)式和超晶格的布洛赫定理而得出。由布洛赫定理, 有 $\psi(a) = \psi(-b) \exp(i\kappa d)$ 。应用此关系, 以及 Bastard 边界条件: $\psi_0^+ = \psi_0^- = \psi_0$ 和 $\psi_0^+/m_a = \psi_0^-/m_b$, 可将(1)式化成

$$\psi(z) = \begin{cases} \psi_0 \left[\cos(\alpha z) + \sin(\alpha z) \frac{\text{ch}(\delta b) \exp(i\kappa d) - \cos(\alpha a)}{\sin(\alpha a) + (1/\gamma) \text{sh}(\delta b) \exp(i\kappa d)} \right] & 0 \leq z \leq a; \\ \psi_0 \left[\text{ch}(\delta z) + \text{sh}(\delta z) \frac{\text{ch}(\delta b) \exp(i\kappa d) - \cos(\alpha a)}{\gamma \sin(\alpha a) + \text{sh}(\delta b) \exp(i\kappa d)} \right] & -b \leq z \leq 0, \end{cases} \quad (3)$$

式中

$$\gamma = \delta m_a / \alpha m_b. \quad (4)$$

从(3)式不难直接用计算验证对称点概率相等或模相等, 即 $|\psi(a/2 + x)| = |\psi(a/2 - x)|$ ($|x| \leq a/2$) 和 $|\psi(-b/2 + x)| = |\psi(-b/2 - x)|$ ($|x| \leq b/2$)。这是由周期方阱的对称性而应有的关系。

对(3)式再次运用布洛赫定理和 Bastard 边界条件, 可以求出如下关系:

$$\cos(\kappa d) = \cos(\alpha a) \text{ch}(\delta b) + \frac{1}{2} (\gamma - 1/\gamma) \sin(\alpha a) \text{sh}(\delta b). \quad (5)$$

从 α 和 δ 的定义式, 以及(4)式可见, (5)式等号右端为能量 E 的复杂函数。(5)式曾经为

其他作者用不同方法导出。但是他们,包括文献[1]的作者,未将此关系作进一步分析,例如未曾凭借此关系进一步明确波函数的形式。可以认为,(5)式最能体现超晶格($\delta b < 1$)与多量子阱结构($\delta b \gg 1$)的差异和联系。注意到,(5)式可视为 γ 的二次方程得二组解

$$\gamma_j = \{ \cos(kd) - \cos(\alpha a) \operatorname{ch}(\delta b) - (-1)^j$$

$$\times \sqrt{[\operatorname{ch}(\delta b) - \cos(kd) \cos(\alpha a)]^2 - \sin^2(kd) \sin^2(\alpha a)} \} / \{ \sin(\alpha a) \operatorname{sh}(\delta b) \}, \quad (6)$$

即当 j 取奇数值时,根式前有“+”号;反之当 j 取偶数值时,根式前有“-”号。当 $\delta b \gg 1$ 时, $e^{-\delta b} \rightarrow 0$, 使(6)式趋于如下的极限形式:

$$\gamma_j = \begin{cases} \tan(\alpha a/2) & j = 1, 3, \dots; \\ -\cot(\alpha a/2) & j = 2, 4, \dots. \end{cases} \quad (7)$$

它们分别为单方阱或孤立方阱的奇、偶数能级本征值方程。(见量子力学教程^[5],但须 $m_o = m_b$)。当 δb 值变小时,超周期性(superperiodicity)显得重要,(6)式中含 k 的项不能忽略而呈现子能带结构,但由于(6)式与参量 δb 的关系是渐变的,方程(6)根式前的正负号将不可能发生突变,也就是说,以下的对应关系将维持不变: j 为奇数时,(6)式代表奇数子能带; j 为偶数时,(6)式代表偶数子能带。随着 $E-k$ 关系作出如此分解,上文所推导的波函数通解中的系数就有了明确的对应关系,而将显示特定形式,这将是下节要研究的问题。这里顺便指出,如果在(6)式中 $kd = n\pi$, 就可以得到奇数带以及偶数带的带底和带顶的能量本征值方程,与文献[1]所给出的带边方程无异,故那些方程都可视为本文之特例。

三、包络波函数及其宇称

单个方势阱的所有奇数 ($j = 1, 3, \dots$) 能级的波函数具有偶宇称(even parity), 而所有偶数 ($j = 2, 4, \dots$) 能级的波函数具有奇宇称(odd parity)。文献[1]中基于这个事实以及关于宇称的进一步考虑,推断出关于周期方势阱带边波函数的宇称,从而求出带边($kd = n\pi$)波函数的具体形式。这里把任意 k 值的波函数表示成易于作物理分析的解析形式,进而阐述其宇称。要说明是,在运用布洛赫定理和 Bastard 边界条件推导波函数时,曾将坐标原点($z = 0$)选在势阱与势垒的交界处,从而方便地得到 ψ 的简洁表达式(3)和 $E-k$ 关系(5)式。但是(3)式的势阱波函数的两个基本函数 $\cos(\alpha z)$ 和 $\sin(\alpha z)$ 并非是指的物理对象,即周期方势阱的奇函数或偶函数(因为势阱的中心点在 $z = a/2$), 势垒波函数的 $\operatorname{ch}(\delta z)$ 和 $\operatorname{sh}(\delta z)$ 情况也类似。因此不易直接同物理图象分析之需要相联系。关于这一点,不妨看看 $\delta b \gg 1$ 的情形,这时可将简化的 $E-k$ 关系,即(7)式代入(3)式,势垒波函数成为 $\psi_0 e^{-\delta |z|}$ 。而势阱波函数取如下形式:

$$\psi_j(z) = \begin{cases} A \cos[\alpha(z - a/2)] & j = 1, 3, \dots; \\ B \sin[\alpha(z - a/2)] & j = 2, 4, \dots, \end{cases} \quad (8a)$$

$$(8b)$$

($A = \psi_0 / \cos(\frac{\alpha a}{2})$, $B = -\psi_0 / \sin(\frac{\alpha a}{2})$), 它们分别具有偶宇称(当 $j = 1, 3, \dots$) 和奇宇称(当 $j = 2, 4, \dots$)。这是关于孤立方势阱波函数的应有结果。根据这个基本事实,为了便于考察超晶格和多量子阱结构波函数之间的联系和差异,尤其是便于分析波函数的

宇称, 将(3)式的势阱波函数表示成 $\cos\left[\alpha\left(z - \frac{a}{2}\right)\right]$ 和 $\sin\left[\alpha\left(z - \frac{a}{2}\right)\right]$ 的线性组合, 势垒波函数表示成 $\text{ch}\left[\delta\left(z + \frac{b}{2}\right)\right]$ 和 $\text{sh}\left[\delta\left(z + \frac{b}{2}\right)\right]$ 的线性组合,

$$\psi_j(z) = \begin{cases} A_j \cos\left[\alpha\left(z - \frac{a}{2}\right)\right] + B_j \sin\left[\alpha\left(z - \frac{a}{2}\right)\right] & 0 \leq z \leq a; \\ C_j \text{ch}\left[\delta\left(z + \frac{b}{2}\right)\right] + D_j \text{sh}\left[\delta\left(z + \frac{b}{2}\right)\right] & -b \leq z \leq 0, \end{cases} \quad (9)$$

其中关于势垒波函数的系数如下:

$$\begin{aligned} C_j &= \phi_0 \left[\text{ch}\left(\frac{\delta b}{2}\right) - P_j \text{sh}\left(\frac{\delta b}{2}\right) \right]; \\ D_j &= \phi_0 \left[P_j \text{ch}\left(\frac{\delta b}{2}\right) - \text{sh}\left(\frac{\delta b}{2}\right) \right], \end{aligned} \quad (10)$$

式中

$$P_j = \frac{\text{ch}(\delta b) \exp(ikd) - \cos(\alpha a)}{\gamma_j \sin(\alpha a) + \text{sh}(\delta b) \exp(ikd)}. \quad (11)$$

关于势阱波函数的系数, 则按奇数带和偶数带, 分别赋予不同形式

$$A_j = \begin{cases} \left(\phi_0 / \cos\left(\frac{\alpha a}{2}\right) \right) \left[1 + \frac{1}{2} \sin(\alpha a) (R_j + iI_j) \right] & j = 1, 3, \dots; \\ \phi_0 \sin\left(\frac{\alpha a}{2}\right) (R_j + iI_j) & j = 2, 4, \dots, \end{cases} \quad (12a)$$

$$B_j = \begin{cases} \phi_0 \cos\left(\frac{\alpha a}{2}\right) (R_j + iI_j) & j = 1, 3, \dots; \\ \left(-\phi_0 / \sin\left(\frac{\alpha a}{2}\right) \right) \left[1 - \frac{1}{2} \sin(\alpha a) (R_j + iI_j) \right] & j = 2, 4, \dots. \end{cases} \quad (12b)$$

(10)和(12a),(12b)式中的 ϕ_0 由波函数的归一化条件给出(见附录)。在(12a)和(12b)式中,

$$I_j = \gamma_j \frac{\sin(kd) [\gamma_j \sin(\alpha a) \text{ch}(\delta b) + \cos(\alpha a) \text{sh}(\delta b)]}{[\text{sh}(\delta b) \cos(kd) + \gamma_j \sin(\alpha a)]^2 + [\text{sh}(\delta b) \sin(kd)]^2}. \quad (13)$$

R_j 则有比 I_j 更复杂的表示式, 但由于对奇、偶数带的 A_j 和 B_j 分别作如上的不同选定, 使得 R_j 与 I_j 之间有如下的简单关系:

$$R_j = (-1)^j (1 - \sqrt{1 - I_j^2 \sin^2(\alpha a)}) / \sin(\alpha a), \quad (14)$$

它是根据上节提到的关于波函数在势阱的对称点模相等, 即关系式

$$\left| \psi\left(\frac{a}{2} + x\right) \right| = \left| \psi\left(\frac{a}{2} - x\right) \right|,$$

而导出的。关系式(14)有着令人满意的性质, 即不难看出 $|R_j|$ 是 $|I_j|$ 的单调上升函数, 而且当 $I_j = 0$ 时 R_j 随之为零。 I_j 的表达式显含 k , 又通过 α, δ 和 γ_j 而隐含 k , 因此有很复杂的关系。数值计算表明, 当 kd 在 $\pi/2$ 附近时 $|I_j|$ 达到最大值, 而当 $kd = n\pi$ 时 $I_j = 0$, 后一性质容易直接从 I_j 的表达式看出。因此当 $kd = n\pi$ 时, $I_j = R_j = 0$ 。

另外从 P_j 的表达式(11)算出,当 $kd = 0$ 时 $P_j = \text{th}\left(\frac{\delta b}{2}\right)$ (j 为奇数)和 $P_j = \text{cth}\left(\frac{\delta b}{2}\right)$ (j 为偶数), 而当 $kd = \pi$ 时 $P_j = \text{cth}\left(\frac{\delta b}{2}\right)$ (j 为奇数)和 $P_j = \text{th}\left(\frac{\delta b}{2}\right)$ (j 为偶数). 将以上关于带边的 I_j, R_j 和 P_j 的数值,代入系数表达式(10),(12a) 和(12b), 再代入(9)式,得到关于带边的波函数的表达式如下:

奇数 ($j = 1, 3, \dots$) 带带底

$$\psi_{j0}(z) = \begin{cases} A \cos \left[\alpha \left(z - \frac{a}{2} \right) \right] & 0 \leq z \leq a; \\ C \text{ch} \left[\delta \left(z + \frac{b}{2} \right) \right] & -b \leq z \leq 0, \end{cases} \quad (15a)$$

奇数 ($j = 1, 3, \dots$) 带带顶

$$\psi_{j\pi}(z) = \begin{cases} A \cos \left[\alpha \left(z - \frac{a}{2} \right) \right] & 0 \leq z \leq a; \\ D \text{sh} \left[\delta \left(z + \frac{b}{2} \right) \right] & -b \leq z \leq 0, \end{cases} \quad (15b)$$

偶数 ($j = 2, 4, \dots$) 带带底

$$\psi_{j\pi}(z) = \begin{cases} B \sin \left[\alpha \left(z - \frac{a}{2} \right) \right] & 0 \leq z \leq a; \\ C \text{ch} \left[\delta \left(z + \frac{b}{2} \right) \right] & -b \leq z \leq 0, \end{cases} \quad (15c)$$

偶数 ($j = 2, 4, \dots$) 带带顶

$$\psi_{j0}(z) = \begin{cases} B \sin \left[\alpha \left(z - \frac{a}{2} \right) \right] & 0 \leq z \leq a; \\ D \text{sh} \left[\delta \left(z + \frac{b}{2} \right) \right] & -b \leq z \leq 0. \end{cases} \quad (15d)$$

上述诸式中 ψ 的第二个下标 0 和 π 为 kd 值,注意: 偶数带带顶同奇数带带底一样,都对应于 $kd = 0$, 而偶数带带底则同奇数带带顶一样, 都对应于 $kd = \pi$ ^[1] (15a)–(15d) 式中的 A 和 B 与 (8) 式的系数一样, C 和 D 分别代表 $\psi_0 / \text{ch}\left(\frac{\delta b}{2}\right)$ 和 $\psi_0 / \sin\left(\frac{\delta b}{2}\right)$.

(15a)–(15d) 式与文献[1]根据波函数宇称的论据而推导的结果完全一样,故文献[1]的 ψ 表达式亦可视为本文 ψ 普遍表达式(9)的几则特例,其特点是这些波函数都具有纯的宇称,这就是文献[1]关于宇称的论据可以奏效之处,至于非带边的波函数则是文献[1]所未能得到的. 本文(9)–(14)式表明,非带边的势阱、势垒波函数都具有混合宇称. 例如,奇数带势阱波函数,混入了奇宇称,而不是纯偶宇称如同孤立阱的奇能级那样(见(8a)式); 同样,偶数带势阱波函数,混入了偶宇称,而不是纯奇宇称(与(8b)式比较). 并且混入异宇称的程度决定于 δb 值,例如当其余参数不变,则 b 越小,这种混入异宇称的程度就越大;又例如,对于给定的超晶格(即 b 也已给定),则越接近势垒顶的子带,这种混入异宇称的程度也就越大,这是因为 $\delta \propto \sqrt{V - E}$ (见(2)式). 根据(9)–(14)式和附录(A.1)等式所作的数值计算,充分肯定了上述基本规律.

四、结 语

本文运用布洛赫原理和 Bastard 边界条件,并根据势阱间从弱耦合 ($\delta b \gg 1$) 到强耦合 ($\delta b < 1$) 过渡的分析,推导出周期方势阱的奇数和偶数子能带的 $E-k$ 关系,以及任意 k 值包络波函数的解析表达式。文献[1]的带边波函数和能量本征值方程可视本文为本文之特例。

文献[1]曾强调,他们关于 Kronig-Penney 模型的新形式,特别是关于带边波函数,对超晶格的分析和实用器件的设计是很有用的。据我们所知,非带边波函数同样为上述两个方面所必需,因为在通常掺杂浓度, $n \geq 10^{18}/\text{cm}^3$, 在室温下,已足以使超晶格第一子能带从带底到带顶的布居都不可忽略,因此任意 k 值的波函数,为物理分析和器件设计所必需。故本文为这些方面提供了更普遍更合适的理论形式。

本文的研究表明,在超晶格中,由于势阱间的隧穿耦合,不仅能级被展宽成子能带,而且使不同宇称的态相混合。电子态的宇称紧密联系于光致跃迁的选择定则,因为在电偶极矩近似下,只有异宇称的态之间,其跃迁几率不为零。显然当电子态具有混合宇称时,光致跃迁过程将显示更丰富的特性。因此本文根据波函数所作的宇称分析,将对超晶格物理性质,例如非线性光学性质的分析有益。

本文关于 Kronig-Penney 模型新的普遍形式,特别适用于半导体超晶格。但只要 $m_b = m_a$, 同样适用于体材料。

附 录

波函数系数(10)和(12a),(12b)式中的 ψ_0 由归一化条件而定,取此条件为

$$\int_{-b}^a |\psi_j(z)|^2 dz = 1.$$

将(9)-(12a),(12b)式代入上式,并运用 R_j, I_j ((13)和(14)式)与 P_j ((11)式)之间的关系,使形式简化,得 ψ_0 如下:

$$\psi_0 = \left\{ a \left[\frac{1 + \gamma_j^2 |P_j|^2}{2} + \frac{\gamma_j \text{Re}(P_j)}{\alpha a} \right] + b \left[\frac{1 - |P_j|^2}{2} + \frac{\text{Re}(P_j)}{\delta b} \right] \right\}^{-1/2}, \quad (\text{A.1})$$

式中 $\text{Re}(P_j)$ 和 $|P_j|$ 分别为(11)式 P_j 的实部和绝对值。

- [1] H.-S. Cho and P. R. Prucnal, *Phys. Rev.*, **B36** (1987), 3237.
- [2] L. Esaki, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-22** (1986), 1611.
- [3] R. de L. Kronig and W. J. Penney, *Proc. Roy. Soc.* **A130** (1930), 499.
- [4] G. Bastard, *Phys. Rev.* **B24** (1981), 5693.
- [5] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill Book Company, Inc., (1955), p. 36.

A NEW GENERAL FORM OF THE KRONIG-PENNEY MODEL SUITABLE FOR SUPERLATTICE STUDIES

PAN SHAO-HUA FENG SI-MIN YANG GUO-ZHEN
Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing, 100080

(Received 26 October 1989)

ABSTRACT

A new form of the Kronig-Penney model has been developed which is more general and practical than the new form in Ref. [1]. It gives not only odd and even index subbands separately but also wave functions for all k values. Moreover, a thorough analysis of the parity of the wave functions can also be given. Hence it affords a more suitable theoretical form for the analysis of superlattices and application to device designs.

PACC: 7340L; 7125T