

GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 异质结附近类氢杂质束缚能及其受像势的影响*

李树深 袁 伟 刘建军 孔小均

(半导体超晶格国家重点实验室 北京 100083)

(河北师范大学物理系 石家庄 050016)

摘要 在有效质量近似下,利用一维化 Euler 方程方法计算了 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 异质结附近类氢杂质基态及 $2p_{\pm}$ 态束缚能及其受像势的影响.在极限情况下,我们的结果可以重现已有的精确解.

PACC: 7865, 6865

1 引言

近年来, GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 异质结量子阱超晶格日益受到大家关注^[1].刘振鹏等人^[2]首先提出了计算一维受限空间中施主原子电离能的一维化计算方法.文[2]采用的是无限高势垒模型.其后,文[2]发展的一维化 Euler 方程方法被广泛用于计算受限空间中类氢杂质束缚能^[3-8].

文[9-12]的计算表明,像势对半导体量子阱内激子束缚能有较明显影响.

本文在文[2]的基础上,用一维化 Euler 方程方法计算 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 异质结附近类氢杂质束缚能及其受像势的影响.计算中采用的是有限高势垒模型.本文第二部分给出了计算基态及 $2p_{\pm}$ 态束缚能的一维化方程;第三部分给出数值计算结果及简要讨论.

2 理论计算

考虑 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 异质结,取笛卡尔坐标系的 z 轴垂直 GaAs 与 Ga_{1-x}Al_xAs 的交迭面,其原点位于交迭面上, GaAs 与 Ga_{1-x}Al_xAs 分别充满 $z < 0$ 和 $z > 0$ 空间,类氢杂质中心位于 GaAs 与 Ga_{1-x}Al_xAs 交迭面附近.在有效质量近似下,取有限高势垒模型并考虑到像势影响时,类氢杂质哈氏量为

$$H = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \nabla^2 - \frac{1}{\epsilon_1} \frac{e^2}{r} - \frac{\epsilon_{12}}{4\epsilon_1} \frac{e^2}{z} + V_1, & z < 0 \end{cases} \quad (1a)$$

$$H = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \nabla^2 - \frac{1}{\epsilon_2} \frac{e^2}{r} - \frac{\epsilon_{12}}{4\epsilon_2} \frac{e^2}{z} + V_2 + V_0, & z > 0 \end{cases} \quad (1b)$$

* 本文 1992 年 8 月 17 日收到,修改稿 1992 年 10 月 26 日收到

其中

$$V_1 = \begin{cases} -\frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_1} \frac{e^2}{r}, & z_0 > 0 \\ -\frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_1} \frac{e^2}{r'}, & z_0 < 0 \end{cases} \quad (1c)$$

$$(1d)$$

$$V_2 = \begin{cases} \frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_2} \frac{e^2}{r'}, & z_0 > 0 \\ \frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_2} \frac{e^2}{r}, & z_0 < 0 \end{cases} \quad (1e)$$

$$(1f)$$

$$r = [\rho^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}, \quad (1g)$$

$$r' = [\rho^2 + (z + z_0)^2]^{1/2}, \quad (1h)$$

$$\epsilon_{12} = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}. \quad (1i)$$

m_1^* 、 ϵ_1 和 m_2^* 、 ϵ_2 分别为 GaAs 和 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 中电子的有效质量与介电常数； z_0 是杂质中心在 z 方向的坐标。不失一般性，让 Z 轴穿过杂质中心， $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$ 表示 xoy 面内电子与杂质中心的距离。

若能量和长度分别以 GaAs 的有效 Redberg ($R_1^* = \frac{m_1^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon_1^2}$) 和有效 Bohr 半径 ($a_1^* = \frac{\hbar^2 \epsilon_1}{m_1^* e^2}$) 为单位，则 (1a—1f) 可以重新写为

$$H = \begin{cases} -\nabla^2 - \frac{2}{r} - \frac{\epsilon_{12}}{2z} + V_1, & z > 0 \\ -\alpha \nabla^2 - \beta \frac{2}{r} - \beta \frac{\epsilon_{12}}{2z} + V_2 + V_0, & z < 0 \end{cases} \quad (2a)$$

$$(2b)$$

$$V_1 = \begin{cases} -\epsilon_{12} \frac{2}{r}, & z_0 > 0 \\ -\epsilon_{12} \frac{2}{r'}, & z_0 < 0 \end{cases} \quad (2c)$$

$$(2d)$$

$$V_2 = \begin{cases} \beta \epsilon_{12} \frac{2}{r'}, & z_0 > 0 \\ \beta \epsilon_{12} \frac{2}{r}, & z_0 < 0 \end{cases} \quad (2e)$$

$$(2f)$$

其中

$$\alpha = \frac{m_1^*}{m_2^*}, \quad \beta = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}. \quad (3)$$

Schrödinger 方程为

$$H\psi = E\psi. \quad (4)$$

在异质结界面处，采用如下边界条件^[14]

$$\begin{cases} \psi_- = \psi_+, \\ \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_- = \alpha \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_+, \end{cases} \quad (5a)$$

$$(5b)$$

式中的“±”号表示 $z \rightarrow 0_{\pm}$.

根据文[2]发展的一维化 Euler 方程方法,引入如下的试探波函数

$$\psi = e^{\lambda r} f_1^{-1/2} W(z) \Phi, \quad (6)$$

其中

$$f_1 = \int |\Phi|^2 e^{2\lambda r} dx dy. \quad (7)$$

上二式中的 λ 为变分参数. 关于 Φ 的表达式及对 Φ 的要求采用与文[2]相同的结果.

经过推算,可以得到如下一维化方程

$$H_{\text{eff}} W(z) = E W(z), \quad (8a)$$

$$H_{\text{eff}} = \begin{cases} -\frac{d^2}{dz^2} + U_1, & z < 0 \end{cases} \quad (8b)$$

$$H_{\text{eff}} = \begin{cases} -\alpha \frac{d^2}{dz^2} + U_2, & z > 0 \end{cases} \quad (8c)$$

其中

$$U_1 = -\frac{K}{F_1} - \frac{1}{4} \left(\frac{F_1'}{F_1} \right)^2 - \frac{\epsilon_{12}}{2z} + U_1', \quad (8d)$$

$$U_2 = V_0 + \alpha U_1 + 2(\alpha - \beta) \frac{F_2}{F_1} - \beta \frac{\epsilon_{12}}{2z} + U_2', \quad (8e)$$

$$U_1' = \begin{cases} -2\epsilon_{12} \frac{F_2}{F_1}, & z_0 > 0 \end{cases} \quad (8f)$$

$$U_1' = \begin{cases} -2\epsilon_{12} \frac{F_2}{F_1} e^{\eta z_1}, & z_0 < 0 \end{cases} \quad (8g)$$

$$U_2' = \begin{cases} 2\beta\epsilon_{12} \frac{F_2}{F_1} e^{\eta z_1}, & z > 0 \end{cases} \quad (8h)$$

$$U_2' = \begin{cases} 2\beta\epsilon_{12} \frac{F_2}{F_1}, & z < 0 \end{cases} \quad (8i)$$

$$K = \frac{1}{2} (\eta F_1' - F_1'') + \lambda [F_2 + \eta(F_1 - z_1 F_2) + z_1 F_2'] + F_{10}. \quad (8j)$$

$F_i' (i=1,2)$ 表示 F_i 对 z_1 求导,且其中的各分量分别为

$$f_1 = \int e^{2\lambda r} |\Phi|^2 dx dy = A e^{-\eta z_1} F_1(z_1), \quad (9a)$$

$$f_2 = \int e^{2\lambda r} |\Phi|^2 \frac{1}{r} dx dy = A e^{-\eta z_1} F_2(z_1), \quad (9b)$$

$$f_3 = \int e^{2\lambda r} \Phi Q^* dx dy = A e^{-\eta z_1} F_3(z_1), \quad (9c)$$

$$f_4 = \int e^{2\lambda r} |\Phi|^2 \frac{1}{r'} dx dy = A F_4(z_1), \quad (9d)$$

其中 A 是依赖于 η 关于 z_1 的普适量,并且

$$z_1 = |z - z_0|, \quad \eta = 2 \left(\frac{1}{n} - \lambda \right). \quad (10)$$

边界条件为

$$\begin{cases} W_- = W_+, \\ \left. \frac{dW}{dz} \right|_- = \alpha \left. \frac{dW}{dz} \right|_+. \end{cases} \quad (11a)$$

$$\quad (11b)$$

对于基态 (1s 态), 可以得到

$$\begin{cases} K = 1 + \lambda, \quad F_1 = z_1 + \frac{1}{2(1-\lambda)}, \\ F_2 = 1, \quad F_3 = 0, \\ F_4 = -\frac{1}{2(1-\lambda)} \int_0^{e^{-2(1-\lambda)z_1}} \left[\left(\frac{\ln x}{2(1-\lambda)} \right)^2 + 4zz_0 \right]^{-1/2} dx. \end{cases} \quad (12)$$

对于 $2p_{\pm}$ 态, 可以得到

$$\begin{cases} K = (1 + 2\lambda)z_1 + \frac{1 + 6\lambda}{2(1 - 2\lambda)}, \\ F_1 = z_1^2 + \frac{3z_1}{1 - 2\lambda} + \frac{3}{(1 - 2\lambda)^2}, \\ F_2 = 1, \quad F_3 = 0, \\ F_4 = \frac{1}{2} \int_0^{e^{-(1-2\lambda)z_1}} \left[\left(\frac{\ln x}{1 - 2\lambda} \right)^2 - z_1^2 \right] \cdot \left[\left(\frac{\ln x}{1 - 2\lambda} \right)^2 + 4zz_0 \right]^{-1/2} dx. \end{cases} \quad (13)$$

将(8)式与(11)式联立, 数值求解可得到 E 值.

3 数值计算结果及简要讨论

取 V_0 及材料参数值如下^[16-18]

$$\begin{cases} V_0 = 0.60(1.155x + 0.37x^2)\text{eV}, \\ m_1^* = 0.067m_0, \quad m_2^* = (0.067 + 0.083x)m_0, \\ \epsilon_1 = 13.1\epsilon_0, \quad \epsilon_2 = [13.1(1 - x) + 10.1x]\epsilon_0, \end{cases} \quad (14)$$

其中 m_0 和 ϵ_0 分别是自由电子质量和真空介电常数, 铝的浓度 x 一般要求小于 0.45^[19].

类氢杂质束缚能 $E_b = -E$.

图 1 和图 2 分别给出了 $x = 0.3$ 时类氢杂质基态及 $2p_{\pm}$ 态束缚能随杂质位置的变化. 由图可见: ①杂质束缚能随 z_0 的增大而减小; ②将本文不计入像势影响的结果(点划线)与文[2]的结果(虚线)相比较, 当杂质位于异质结表面 ($z_0 = 0$) 上时, 二者相差最大, 当 $z_0 \rightarrow -\infty$ 时, 二者相差逐渐减少. 在与虚线相对应的范围内, 点划线的值始终大于虚线值; ③将本文计入像势影响(实线)与不计入像势影响(点划线)的结果相比较, 在 z_0 整个范围内, 像势使束缚能减小. 当杂质中心远离异质结界面时, 像势影响逐渐减小; ④将本文计入像势影响(实线)的结果与文[2]的结果(虚线)相比较, 二者出现交叉点. 出现这一结果的原因可能是, 当杂质中心紧靠异质结界面时, 由于文[2]中无限高势垒的作用, 将电子中心大大推向 $z = -\infty$ 一方, 使杂质中心对电子的束缚作用减小, 而此时像势的作用并不太明显, 导致虚线值小于实线值. z_0 由 0 逐渐向 $-\infty$ 移动时, 无限高势垒对电子的推移作用迅速减小, 而像势的作用减弱并不太明显, 致使二者出现相交. z_0 由交叉点再向 $-\infty$ 移动时, 像势的影响超过无限势垒的影响, 致使实线值小于相应的虚线值.

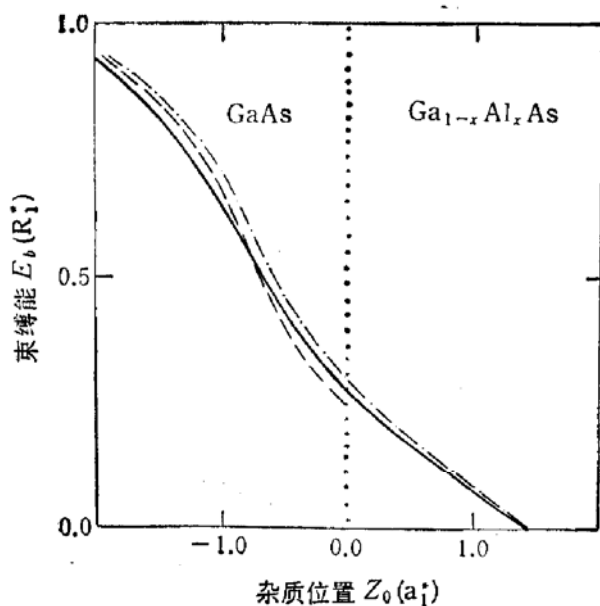


图1 $x = 0.3$ 时类氢杂质基态束缚能 E_b 随杂质位置的变化
实线计入了像势影响, 点划线没计入像势影响, 虚线为文[2]的结果, 点线为异质结界面

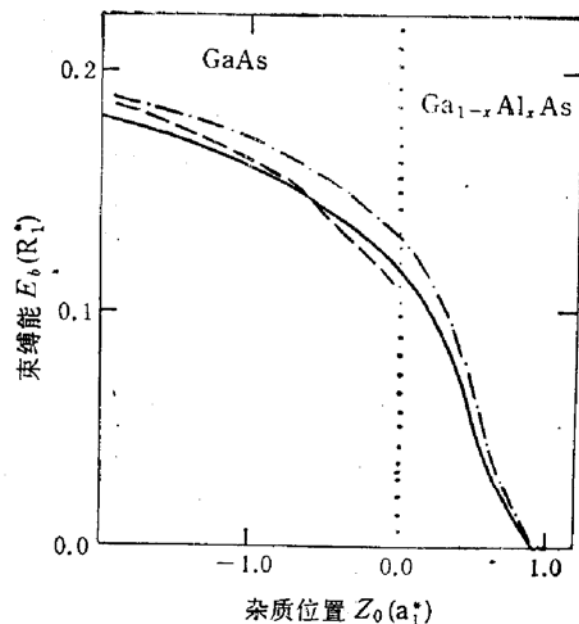


图2 $x = 0.3$ 时 $2p_{\pm}$ 态束缚能随杂质位置的变化
实线计入了像势影响, 点划线没计入像势影响, 虚线为文[2]的结果, 点线为异质结界面

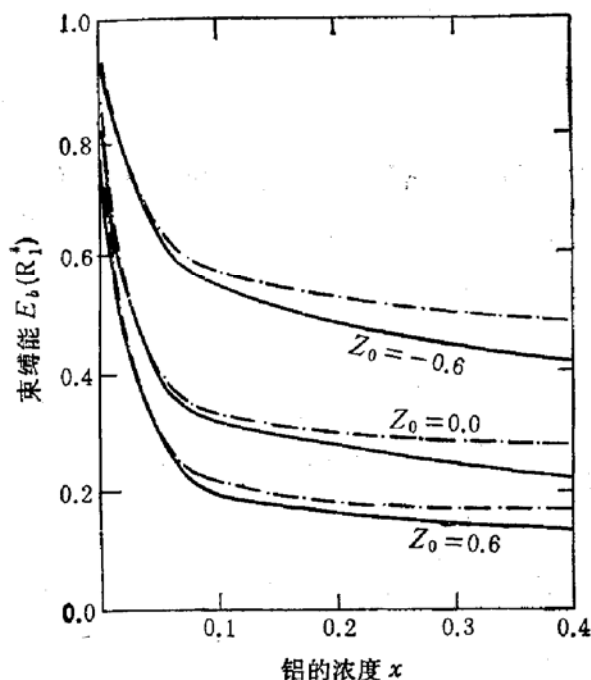


图3 基态束缚能随铝的浓度 x 的变化
点划线为没有计入像势影响

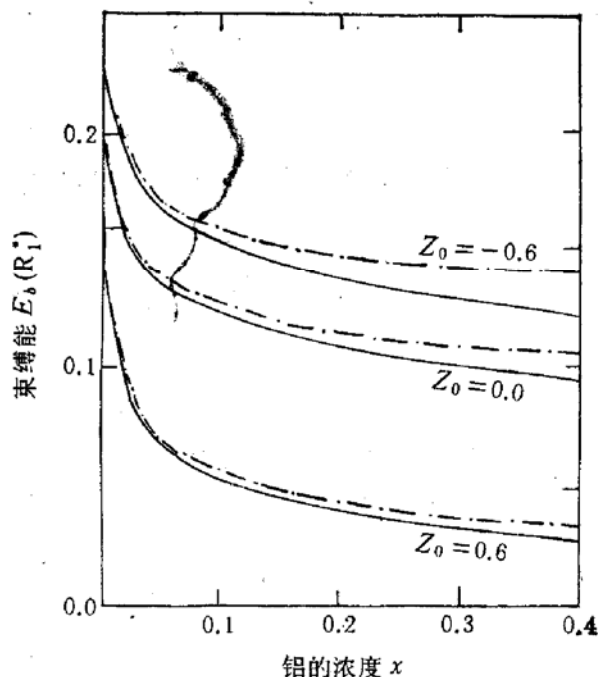


图4 $2p_{\pm}$ 态束缚能随铝的浓度 x 的变化
点划线没有计入像势影响

图3与图4给出了几个 z_0 值下类氢杂质基态及 $2p_{\pm}$ 态束缚能随铝的浓度 x 的变化。由图可见, 随 x 的增大, 势垒高度加大, 导致束缚能逐渐减小; 同时, 随 x 的增大, ϵ_2 与 ϵ_1 的差别加大, 导致像势对束缚能的影响加大。当 x 逐渐减小到 0 时, 再现极限情况下的精确解 $E_b = 1R_1^*$ (基态) 及 $E_b = 0.25R_1^*$ ($2p_{\pm}$ 态)。

参 考 文 献

- [1] 黄昆,物理,1986,15: 329.
- [2] 刘振鹏,半导体学报1983,4: 313.
Zhenpeng Liu and D. L. Lin, Phys. Rev., 1983, B28: 4413.
- [3] 刘振鹏,半导体学报 1984,5: 327.
- [4] 刘振鹏,李克天,半导体学报,1985,6: 33.
Zhenpeng Liu and Tianki Li, J. Phys., 1985, C18:691.
- [5] 马德录,刘振鹏,半导体学报,1986,7: 164.
- [6] 李树深,焦善庆,半导体学报,1990,11: 647.
- [7] 李树深,半导体学报,1991,12: 715.
- [8] Shu-Shen Li and Xiao-Jun Kong, J. Phys.: Condens. Matter 1992, 4:4815.
- [9] D. M. Wittaker and R. J. Elliott, Solid State Commun., 1988, 68:1.
- [10] Masami Kumagai and Toshihide Takagahara, Phys. Rev., 1989, B40:12359.
- [11] D. B. Tran Thoai, R. Zimmermann, M. Grundmann and D. Bimberg, Phys. Rev., 1990, B42: 5906.
- [12] L. Wendler and B. Hartwig, J. Phys.: Condens. Matter 1991, 3:9907.
- [13] A. M. Gabovich, V. M. Rozenbium, Eiz. Tver. Tela (Leningrad), 1985, 27:761 [Sov. Phys., Solid State, 1985, 27(3): 468].
- [14] T. Ando and S. Mori, Surf. Sci., 1982, 113:124.
- [15] D. A. B Miller, D. S. Chemla, T. D. Damen, A. C. Gossard, W. Wiegmann, T. H. Wood and C. A. Barrus, Phys. Rev., 1985, B32: 1043.
- [16] H. J. Lee L. Y. Juravel, J. C. Woolley and A. J. Springthorpe, Phys. Rev., 1980, B21:659.
- [17] C. Maihiot, Y. C. Chang and T. C. McGill, Surf. Sci., 1982, 113:161.
- [18] C. Maihiot, Y. C. Chang and T. C. McGill, Phys. Rev., 1982, B26:4449.
- [19] 王迅,物理,1988,16: 397.

Calculation of Binding Energy and Effect of Image Potential on Binding Energy of Hydrogenic Impurity near GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs Heterojunction

Li Shushen, Yuan Wei, Liu Jianjun and Kong Xiaojun

(National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Beijing 100083)

(Department of Physics, Hebei Teachers' University, Shijiazhuang 050016)

Abstract In the effective mass approximation, the method of one-dimensionalised Euler's equation is used to calculate the binding energy and the effect of the image potential on the binding energies of the ground state and the $2p_{\pm}$ states of hydrogenic impurities near a GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs heterojunction. Our results can reappear the exact solution in the limit.

PACC: 7865, 6865