

文章编号: 1672-8785(2010)06-0040-05

利用 MATLAB 和行列式计算超晶格束缚态能量本征值的一种简捷方法

王忆锋 唐利斌

(昆明物理研究所, 云南昆明 650223)

摘 要: 在计算超晶格束缚态能量本征值时, 根据势阱与势垒界面的连续性条件, 将界面两侧的波函数展开为一个以矩阵方程描述的线性方程组, 再根据束缚态的能量本征值必须满足该方程组的系数行列式等于零的要求, 在能量区间内进行逐点扫描, 并利用 MATLAB 矩阵行列式计算函数, 即可确定相应的能量本征值。与递推法、转移矩阵法等其他方法相比, 该方法不需要花费较多的精力来编程, 具有概念简单、使用方便、实用性强等特点。

关键词: 半导体; 超晶格; 束缚态; 能量本征值; 薛定谔方程; MATLAB

中图分类号: O471.1 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2010.06.009

An Efficient Method for Calculating Bound State Energy Eigenvalue of Superlattice with Determinant in MATLAB

WANG Yi-feng, TANG Li-bin

(Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China)

Abstract: While calculating the bound state energy eigenvalues of a superlattice, the wave functions on both sides of the interface between a potential well and a potential barrier are extended into a set of linear equations which can be described with a matrix equation. Then, according to the requirement that the energy eigenvalues must satisfy the condition in which the coefficient determinant of linear equations is equal to zero, the energy region is scanned point by point. Thus, the corresponding energy eigenvalues can be determined with a function of the matrix determinant in MATLAB. Compared with other methods such as iteration and transfer matrix, the method does not need more efforts in programming and is simple in concept, convenient in operation and practical.

Key words: semiconductor ; superlattice; bound state; energy eigenvalue; Schrödinger equation; MATLAB

1 引言

基于超晶格的量子阱器件可以用于红外探测^[1]。量子阱器件的设计需要确定本征能量值, 其计算中就要求解一系列的一维薛定谔方程。将该线性方程组表达为矩阵方程, 并借助 MATLAB

提供的矩阵行列式计算函数, 在能量分布区间内进行逐点扫描, 计算出每一个能量值所对应的系数行列式值, 其中满足行列式等于零的值即为能量本征值, 这种方法可以简化本征值的求解过程。

收稿日期: 2009-12-23

作者简介: 王忆锋 (1963-), 男, 湖南零陵人, 工学士, 高级工程师, 主要从事器件仿真研究工作。E-mail: wangyifeng63@sina.com

2 超晶格中束缚态粒子对应的波函数

超晶格是一种由势垒和势阱构成的人造周期性结构。如图 1 所示, 设势垒和势阱的排列方式为 BABA...BA, A 代表势阱, 其宽度为 a ; B 代表势垒, 其宽度为 b ; 超晶格的周期为 $a+b$, 其中每个周期中都有一个界面。

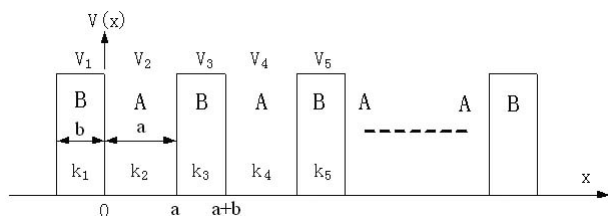


图 1 以 BABA...BA 形式周期排列的超晶格结构

对于超晶格的情况, 一维定态薛定谔波动方程为

$$\frac{d^2\varphi_j}{dx^2} + \frac{8\pi^2m_j(E - V_j)}{h^2}\varphi_j = 0 \quad (j = 1, 2, \dots) \quad (1)$$

式中, h 为普朗克常数, E 为能量, V_j 是由不同半导体材料形成的势垒或势阱的位势, m_j 为有效质量, 超晶格中不同位势处入射电子的有效质量不同。式 (1) 的通解为

$$\varphi_j(x) = C_1 \exp(ik_j x) + C_2 \exp(-ik_j x) \quad (2)$$

式中, k_j 称为波数, 并有

$$k_j = \frac{2\pi\sqrt{2m_j(E - V_j)}}{h} \quad (3)$$

式中, C_1 、 C_2 为待定系数。波函数作箱归一化处理后, 若粒子只能在箱内运动, 它出现在无穷远处 (箱外) 的概率为零, 这种状态称为束缚态; 反之, 称为非束缚态。对于非束缚态问题, 能量 E 是已知的, 可以连续取值; 而对于束缚态问题, 能量 E 是待求的本征值^[2]。就式 (3) 而言, 当 $E < V_j$ 时, 可能存在束缚态的解, 否则就只有非束缚态的解。

对于图 1 所示的超晶格结构, 逐一对每个

V_j 写出式 (2), 有

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = C_1 \exp(ik_1 x) + C_2 \exp(-ik_1 x) \\ \varphi_2(x) = C_3 \exp(ik_2 x) + C_4 \exp(-ik_2 x) \\ \dots \\ \varphi_N(x) = C_{2N-1} \exp(ik_N x) + C_{2N} \exp(-ik_N x) \\ \varphi_{N+1}(x) = C_{2N+1} \exp(ik_{N+1} x) + C_{2N+2} \exp(-ik_{N+1} x) \end{cases} \quad (4)$$

本文讨论 $E > V_j (j = 2, 4, 6, \dots, N)$ (N 为偶数) 且 $E < V_k (k = 1, 3, 5, \dots, N+1)$ 的情况。对于第一个波函数 $\varphi_1(x)$, 因为 $E < V_1$, 故 k_1 为虚数; 当 $x \rightarrow \infty$ 时, $\exp(ik_1 x)$ 变为无穷大, 所以必须 $C_1 = 0$ 。类似地, 对于最后一个波函数 $\varphi_{N+1}(x)$, 当 $x \rightarrow \infty$ 时, $\exp(-ik_{N+1} x)$ 变为无穷大, 因此必须 $C_{2N+2} = 0$ 。故各区域的波函数为

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = C_2 \exp(-ik_1 x) \\ \varphi_2(x) = C_3 \exp(ik_2 x) + C_4 \exp(-ik_2 x) \\ \dots \\ \varphi_N(x) = C_{2N-1} \exp(ik_N x) + C_{2N} \exp(-ik_N x) \\ \varphi_{N+1}(x) = C_{2N+1} \exp(ik_{N+1} x) \end{cases} \quad (5)$$

3 用 MATLAB 和行列式计算超晶格能量本征值

在超晶格界面处, 波函数必须满足下列连续性条件

$$\begin{cases} \varphi_j(x_j) = \varphi_{j+1}(x_j) \\ \frac{\varphi'_j(x_j)}{m_j} = \frac{\varphi'_{j+1}(x_j)}{m_{j+1}} \end{cases} \quad (6)$$

考虑到程序中有关物理常数量值上的平衡性, 将式 (6) 改写为

$$\begin{cases} \varphi_j(x_j) = \varphi_{j+1}(x_j) \\ \varphi'_j(x_j) = r_{j+1} \varphi'_{j+1}(x_j) \end{cases} \quad (7)$$

式中

$$r_{j+1} = \frac{m_j}{m_{j+1}} \quad (8)$$

设有 N 个界面, 则式 (7) 展开后具有下列形式

$$\left\{ \begin{array}{l} C_2 \exp(-ik_1 x_1) - C_3 \exp(ik_2 x_1) - C_4 \exp(-ik_2 x_1) = 0 \\ C_3 \exp(ik_2 x_2) + C_4 \exp(-ik_2 x_2) - C_5 \exp(ik_3 x_2) - C_6 \exp(-ik_3 x_2) = 0 \\ \dots \\ C_{2N-1} \exp(ik_N x_N) + C_{2N} \exp(-ik_N x_N) - C_{2N+1} \exp(ik_{N+1} x_N) = 0 \\ -C_2 k_1 \exp(-ik_1 x_1) - C_3 k_2 r_2 \exp(ik_2 x_1) + C_4 k_2 r_2 \exp(-ik_2 x_1) = 0 \\ C_3 k_2 \exp(ik_2 x_2) - C_4 k_2 \exp(-ik_2 x_2) - C_5 k_3 r_3 \exp(ik_3 x_2) + C_6 k_3 r_3 \exp(-ik_3 x_2) = 0 \\ \dots \\ C_{2N-1} k_N \exp(ik_N x_N) - C_{2N} k_N \exp(-ik_N x_N) - C_{2N+1} k_{N+1} r_{N+1} \exp(ik_{N+1} x_N) = 0 \end{array} \right. \quad (9)$$

上述方程组可以用矩阵形式记为

$$\mathbf{M}\mathbf{C} = 0 \quad (10)$$

式中, $\mathbf{M}$ 为 $2N \times 2N$ 阶方阵, $\mathbf{C}$ 为 $2N \times 1$ 阶矩阵:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 \\ \mathbf{M}_2 \\ \mathbf{M}_3 \\ \mathbf{M}_4 \\ \mathbf{M}_5 \\ \mathbf{M}_6 \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{2N} \\ C_{2N+1} \end{bmatrix} \quad (12)$$

另外, $\mathbf{M}_1$ 、 $\mathbf{M}_3$ 、 $\mathbf{M}_4$ 和 $\mathbf{M}_6$ 为 $1 \times 2N$ 阶矩阵, $\mathbf{M}_2$ 和 $\mathbf{M}_5$ 为 $(N-2) \times 2N$ 阶矩阵。它们的构成如下:

$$\mathbf{M}_1 = \begin{bmatrix} \exp(-ik_1 x_1) & -\exp(ik_2 x_1) & -\exp(-ik_2 x_1) & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{bmatrix} 0 & \exp(ik_2 x_2) & \exp(-ik_2 x_2) & -\exp(ik_3 x_2) & -\exp(-ik_3 x_2) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp(ik_3 x_3) & \exp(-ik_3 x_3) & -\exp(ik_4 x_3) & -\exp(-ik_4 x_3) & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \dots & -\exp(ik_{N-1} x_{N-2}) & -\exp(-ik_{N-1} x_{N-2}) & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \exp(ik_{N-1} x_{N-1}) & \exp(-ik_{N-1} x_{N-1}) & -\exp(ik_N x_{N-1}) & -\exp(-ik_N x_{N-1}) & 0 & 0 & \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\mathbf{M}_3 = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \exp(ik_N x_N) & \exp(-ik_N x_N) & -\exp(ik_{N+1} x_N) \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$\mathbf{M}_4 = \begin{bmatrix} -k_1 \exp(-ik_1 x_1) & -k_2 r_2 \exp(ik_2 x_1) & k_2 r_2 \exp(-ik_2 x_1) & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (16)$$

$$\mathbf{M}_5 = \begin{bmatrix} 0 & k_2 \exp(ik_2 x_2) & -k_2 \exp(-ik_2 x_2) & -k_3 r_2 \exp(ik_3 x_2) & k_3 r_2 \exp(-ik_3 x_2) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & k_3 \exp(ik_3 x_3) & -k_3 \exp(-ik_3 x_3) & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -k_{N-1} r_{N-1} \exp(ik_{N-1} x_{N-2}) & k_{N-1} r_{N-1} \exp(-ik_{N-1} x_{N-2}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ k_{N-1} \exp(ik_{N-1} x_{N-1}) & -k_{N-1} \exp(-ik_{N-1} x_{N-1}) & -k_N r_N \exp(ik_N x_{N-1}) & k_N r_N \exp(-ik_N x_{N-1}) & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$\mathbf{M}_6 = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & k_N \exp(ik_N x_N) & -k_N \exp(-ik_N x_N) & -k_{N+1} r_N \exp(ik_{N+1} x_N) \end{bmatrix} \quad (18)$$

根据线性代数理论, 为了得到非零解, 式 (10) 的系数行列式 $\mathbf{M}$ 必须等于零, 即

$$\det(\mathbf{M}) = 0 \quad (19)$$

这是束缚态能量本征值必须满足的基本条件^[3-5]。式 (19) 是一个关于能量本征值 E 的超越方程, 其解析表达式很难获得。

根据光量子理论, 粒子的能量 E 与波长 λ 之间有下列关系:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (20)$$

式中, c 为光速。将上式的量纲统一到 μm 和 eV , 则有

$$E = \frac{1.2398}{\lambda} (\text{eV}) \quad (21)$$

对于有具体应用背景的光电器件, 其工作波长范围一般是已知的, 由此可以确定 E 值存在的大体区域。MATLAB 提供的 $\det()$ 命令可用于计算行列式的值。利用式 (19) 为判据来做数值计算, 逐点扫描给定范围内的 E 值, 凡是满足式 (19) 的 E 值即为能量本征值。据此可以编写如下所示的一个 MATLAB 程序。

```
clear all; close all;
h=4.135702*1e-15; m0=5.6935e-30; % 物理常量
N=10; a=10; b=4; % 超晶格参数
x=zeros(1,N+1); for j=1:N if rem(j,2)==1 x(j+1)=x(j)+a; else x(j+1)=x(j)+b; end; end % 分配 x 坐标
V1=0.29988; V2=0.0; % 定义势能常数
V=zeros(1,N+1); for j=1:N+1 if rem(j,2)==1 V(j)=V1; else V(j)=V2; end; end % 分配势能函数
m1=0.0657*m0; m2=0.09014*m0; % 有效质量
m=zeros(1,N+1); for j=1:N+1 if rem(j,2)==1 m(j)=m1; else m(j)=m2; end; end % 分配有效质量
m(1)=m0; m(N+1)=m0; r=ones(1,N+1); j=2; while j<=N+1 r(j)=m(j-1)/m(j); j=j+1; end
index=1; index1=1; counter=0; % 计数器
k=zeros(1,N+1);
for lambda=8:0.01:12; % 定义波长区间
E=1.2398/lambda; for j=1:N+1 k(j)=2*pi*sqrt(2*m(j)*(E-V(j)))/h; end % 计算波数 k(x)
% 下面计算矩阵分量 M1 和 M3
M1=zeros(1,2*N); M1(1,1)=exp(-i*k(1)*x(1)); M1(1,2)=-exp(i*k(2)*x(1)); M1(1,3)=-exp(-i*k(2)*x(1));
M3=zeros(1,2*N); M3(1,2*N-2)=exp(i*k(N)*x(N)); M3(1,2*N-1)=exp(-i*k(N)*x(N));
M3(1,2*N)=-exp(i*k(N+1)*x(N));
% 下面计算矩阵分量 M4
M4=zeros(1,2*N); M4(1,1)=-k(1)*exp(-i*k(1)*x(1));
M4(1,2)=-k(2)*r(2)*exp(i*k(2)*x(1)); M4(1,3)=k(2)*r(2)*exp(-i*k(2)*x(1));
% 下面计算矩阵分量 M6
M6=zeros(1,2*N); M6(1,2*N-2)=k(N)*exp(i*k(N)*x(N));
M6(1,2*N-1)=-k(N)*exp(-i*k(N)*x(N)); M6(1,2*N)=-k(N+1)*r(N+1)*exp(i*k(N+1)*x(N));
% 下面计算矩阵分量 M2 和 M5
M2=zeros(N-2,2*N); M5=zeros(N-2,2*N);
q=1; p=1;
for n=1:N-2
```

```

for pp=(p+1):(p+4)
    switch q
        case 1; M2(n,pp)=exp(i*k(n+1)*x(n+1)); M5(n,pp)=k(n+1)*exp(i*k(n+1)*x(n+1));
        case 2; M2(n,pp)=exp(-i*k(n+1)*x(n+1)); M5(n,pp)=-k(n+1)*exp(-i*k(n+1)*x(n+1));
        case 3; M2(n,pp)=-exp(i*k(n+2)*x(n+1)); M5(n,pp)=-k(n+2)*r(n+2)*exp(i*k(n+2)*x(n+1));
        case 4; M2(n,pp)=-exp(-i*k(n+2)*x(n+1)); M5(n,pp)=k(n+2)*r(n+2)*exp(-i*k(n+2)*x(n+1));
    end % switch 结束
    q=q+1;
end
q=1; p=p+2;
end
M(index)=det([M1;M2;M3;M4;M5;M6]); % 计算行列式值
if (real(M(index))==0) EigenValue(index1)=E; index1=index1+1; counter=counter+1; end;
index=index+1;
end
disp([' 本征值个数 ' num2str(counter)])

```

作为一个示例,上述程序是在 $8\mu\text{m} \sim 12\mu\text{m}$ 波长范围内以 0.001eV 的能量间距进行扫描的。程序中取下列初始参数^[2]:

$$\begin{aligned}
 m_1 &= m_{N+1} = m_0 \\
 &= 5.6935 \times 10^{-30} \text{s}^2 \cdot \text{eV}/\text{nm}^2 \quad (m_0 \text{ 为电子质量}) \\
 m_3 &= m_5 = \dots = 0.0657m_0 \\
 m_2 &= m_4 = m_6 = \dots = 0.09014m_0 \\
 V_1 &= V_3 = V_5 = \dots = 0.29988\text{eV} \\
 V_2 &= V_4 = V_6 = \dots = 0.0\text{eV}, \quad a=4\text{nm}, \quad b=10\text{nm}
 \end{aligned}$$

对于本文分析的问题,最理想的是其输出结果直接为零值,但是这种情况可能较少甚至没有;较多的情况是计算结果为一个虚数值。实用中可首先以行列式是否为零为判断条件进行筛选;如果没有,再将判断条件放宽到行列式的实部系数等于零以寻找本征值。

在程序中改变各种参数,即可找出本征值分布的变化情况。例如,当 $N=6$ 时,本征值有 12 个,分别为 0.15401 、 0.14973 、 0.14848 、 0.14672 、 0.14535 、 0.14484 、 0.1393 、 0.11887 、 0.11598 、 0.11512 、 0.11109 和 0.10904eV ; 当 $N=7$ 时,本征值的个数为零;当 $N=20$ 时,本征值的个数为零;当 $N=30$ 时,本征值有 7 个,等等。比较特别的是,当 $N=2$ 时,计算的是一维方势阱的本征值情况^[6]。

4 结束语

常用的能量本征值计算方法有转移矩阵法、递推公式法等,它们的概念或算法较为抽象,同时在程序调试上也有一定的工作量。本文介绍的方法利用 MATLAB 行列式计算命令,其概念直观,程序实现简单。对不同规格超晶格的能量本征值的计算,只需要在上述程序中修改相应参数即可,主体部分可保持不变,因而这种方法具有一定的通用性。

参考文献

- [1] Mohamed Henini, Manijeh Razeghi. Handbook of Infrared Detection Technologies [M]. Elsevier Science Ltd., 2002.
- [2] 井孝功. 量子力学 [M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业出版社, 2004.
- [3] Donald A Neamen 著, 赵毅强, 姚素英, 解晓东, 等译. 半导体物理与器件 (第三版) [M]. 北京: 电子工业出版社, 2005.
- [4] 野村昭一郎 著, 李彬, 黄东律, 等译. 量子力学入门 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1985.
- [5] D S 萨克林 著, 苏耀中, 叶安祚 译. 初等量子力学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1985.
- [6] 王忆锋, 唐利斌. 一维方势阱束缚态能量本征值的 MATLAB 行列式分析及广义量子数概念 [J]. 红外, 2010, 31(5): 41-45.