

# 一维薛定谔方程的传递矩阵法求解\*

0471.5

陆卫 穆耀明<sup>▽</sup> 万明芳 陈效双 刘兴权 窦红飞 李 宁 沈学础

0413

(中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家重点实验室, 上海, 200083;  
中国高等微结构科技研究中心, 江苏, 南京, 210093)

**摘要** 报道应用传递矩阵方法直接在数值上确定任意一维势结构中的束缚态与准束缚态. 通过对  $2 \times 2$  矩阵乘积过程中的数据分解处理, 使该方法可直接应用于实际器件尺度的异质结构系统, 给出了在具有实际超晶格结构尺度的二种超晶格子带特性上的应用.

**关键词** 传递矩阵, 一维势, 束缚态

薛定谔方程 电子能态

## 引言

半导体

随着半导体薄膜工艺技术的发展, 人们可用通过对量子阱异质结构和超晶格进行人工设计发展新型的电子与光电器件<sup>[1]</sup>, 为此, 必须解决这些结构中的电子本征能态问题. 人们可以用解析方法求解的结构种类是十分有限的, 如方势阱或抛物阱等, 但即使对这类阱, 当存在外电场扰动时亦不能精确求解. 变分法虽然常被用来解决一些微扰问题, 但它很难处理基态以外的电子能态, 所以人们开始关注用传递矩阵方法解决任意一维势结构中的电子能态问题<sup>[2~4]</sup>, 并已能解决单个阱或几个耦合阱中电子能态及共振隧穿问题. 但当被研究的结构尺寸过大时, 数值计算中会出现数值溢出而无法计算. 目前实际器件的异质结构总的纵向尺寸会达到微米量级, 而文献[2]中报道的方法对较低能量的能态往往只能求解到纵向尺寸约  $0.1 \mu\text{m}$ . 要解决实际器件结构中的问题, 需要对传递矩阵方法进行改进. 针对这一问题, 本文通过对传递矩阵方法的波函数传递过程中原点平移及  $2 \times 2$  矩阵乘积过程中数据的分解处理使所研究的对象可扩展到微米量级, 满足实际器件结构研究的需求.

## 1 理论

我们在理论处理上采用文献[2]中的基本处理原理, 即将一维任意势函数分解成足够精细的用台阶势表达的众多小区域集合. 然后用传递矩阵方法进行数值求值. 一维结构中的电子能态由一维薛定谔方程决定:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (1)$$

其中  $m^*$  是电子有效质量,  $x$  是位置坐标,  $E$  为能量,  $\varphi(x)$  为波函数,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  为普朗克常数,  $V(x)$  为势函数. 对于图 1 所示的势, 在  $V_{\text{min}} < E < V_1$  区域会有有限个数的束缚态, 而在

\* 国家自然科学基金杰出青年人才基金(编号 19525409)和国家自然科学基金(编号 69776018)资助项目  
稿件收到日期 1997-09-24, 修改稿收到日期 1998-02-27

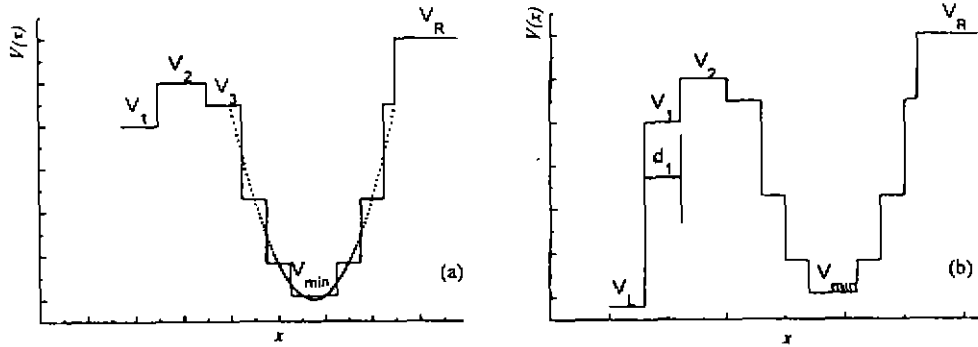


图1 (a) 任意形状势(虚线)可被近似表达成若干台阶势(实线);

(b) 引入附加势  $V_L$  获得的(a)中势的电子束缚能或准束缚能

Fig. 1 (a) An arbitrary potential (dashed line) is approximated by a step-like potential (solid line). (b) An additional potential  $V_L$  is introduced to numerically obtain the bound or quasi-bound states in potential presented by (a)

$V_1 < E < V_2$  区域会存在若干准束缚态. 对于图1(a)中虚线表示的任意形状一维势, 总可以用类似于图1(a)中虚线所示那样的台阶进行分解, 只要台阶分得足够细, 总可足够逼近真实势. 类似于文献[2]的处理, 我们引入一个势区域, 即  $V_L$  区域, 取  $V_L \leq V_{\min}$  当  $d_1 \rightarrow \infty$  时, 图1(b)的势就等效于(a)中的台阶势. 在第  $j$  区域内,  $V(x)$  被近似为常数  $V_j$ . 为避免指数数值溢出, 取第  $j$  区域内函数为  $\varphi(x) = A_j e^{k_j(x-x_{j-1})} + B_j e^{-k_j(x-x_{j-1})}$ .

由界面处波函数与波函数导数连续的边界条件, 可得第  $j$  个界面处的传递矩阵为

$$T_j = \frac{1}{2G_j} \begin{pmatrix} (G_j + G_{j-1})e^{k_{j-1}(x_j - x_{j-1})} & (G_j + G_{j-1})e^{k_{j-1}(x_j - x_{j-1})} \\ (G_j + G_{j-1})e^{k_{j-1}(x_j - x_{j-1})} & (G_j + G_{j-1})e^{k_{j-1}(x_j - x_{j-1})} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

其中  $G_j = \frac{k_j}{m_j}$ ,  $G_{j-1} = \frac{k_{j-1}}{m_{j-1}}$ . 利用第1和第  $n$  个界面处的边界条件, 我们可将左面 L 区域的入射和反射波振幅与右面 R 区域的传输波振幅联系起来, 即

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = T_n T_{n-1} \cdots T_2 T_1 \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = T' \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}. \quad (3)$$

在结构较大时,  $T_i$  的乘积过程中会出现数值溢出的现象, 为了解决这一问题我们将乘积过程进行了数学归一, 最后再将该归一化因子计入结果. 电子的传输系数  $\theta$  为

$$\theta = t t'_0 \left( t = T'_{11} - \frac{T'_{12} T'_{21}}{T'_{22}} \right) \quad (4)$$

根据传输系数的峰位可以定出结构的束缚能态和准束缚能态的能量值. 为了获得具有任意结构的系统中能态, 我们采用下述过程: (1) 首先在结构外引入一个比最低势能还要小或相等的势区域; (2) 计算  $\theta$  值; (3) 让附加的势区域向无穷远移动, 从而得出结构系统中真实的本征量值. 实际上附加势区域在向无穷远移动中, 由式(4)给出传递系数中峰位能

量值能很快收敛到真实本征能量值.

## 2 在超晶格结构中的应用

### 2.1 超晶格色散关系

为表明上述方法对实际器件尺寸异质结构的可用性,我们考虑两种典型的超晶格体系:(1)由方势阱组成的 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 超晶格体系:阱宽  $L_w=7\text{nm}$ ,垒宽  $L_b=3\text{nm}$ ,总体上有 100 个周期(总厚度为  $1.0\mu\text{m}$ );(2)由抛物势阱组成 Ga<sub>1-y</sub>Al<sub>y</sub>As/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 超晶格体系,阱中势为  $V(x)=\frac{4V_b}{L_w}\left(x-x_0-\frac{L_w}{2}\right)^2$ ,这里  $x_0$  为阱的原点位置坐标, $V_b$  是对应 Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 势垒高度, $L_w$  是抛物阱的阱口宽度,垒宽为  $L_b=3\text{nm}$ ,总体上亦为 100 个周期.在具体数值计算中我们取 Al<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 相对 GaAs 的带隙增量为  $\Delta E(y)=1.247y$ ,有效质量随 Al 组份变化关系为<sup>[5]</sup> $m^*(y)=0.067+0.083y$ .导带的不连续因子取为 0.60.对上述两种结构算出的传输系数如图 2(a)和(b)所示.正象预期的那样,两种结构的传输系数有很多相似之处.由于整个结构体系的总厚度有  $1\mu\text{m}$ ,所以最小的传输系数已达  $10^{-400}$ ,这一数值在计算机数值计算中已进入溢出范围.两种结构在势垒以下区域都存在 2 个子带,而抛物阱组成的子带能量对方阱上移,这是由于本文参数下抛物阱的有效阱宽比方阱小的原故.仔细观察这些子带可以发现每个子带内存在着 100 个分裂的能态,这 100 个能态的包络函数表现出的波矢为  $n\pi/100$  ( $n=1,2,\dots,100$ ).这是 100 个阱中的能态相互耦合而形成相应子带.由于计算中超晶格长度有限,所以子带中仍是分裂能级.将能级位置和相应波矢特征考虑在一起,可以获得相应子带的色散关系,如图 3 所示.从图 3 可见两种结构中子带色散关系十分相似.对抛物阱超晶格,第一子带中心到第二子带中心的能间距  $\Delta E_1$  与第二子带中心到第三子带中心间距  $\Delta E_2$  相等,而对方势阱超晶格,则有  $\Delta E_2 > \Delta E_1$ .这是抛物阱中的相邻能级间距为常数这一特征的反映.

### 2.2 超晶格中的界面粗糙度影响

在实际超晶格样品中,每个异质界面都不会象模型设计的那么平整,每个界面上都可能

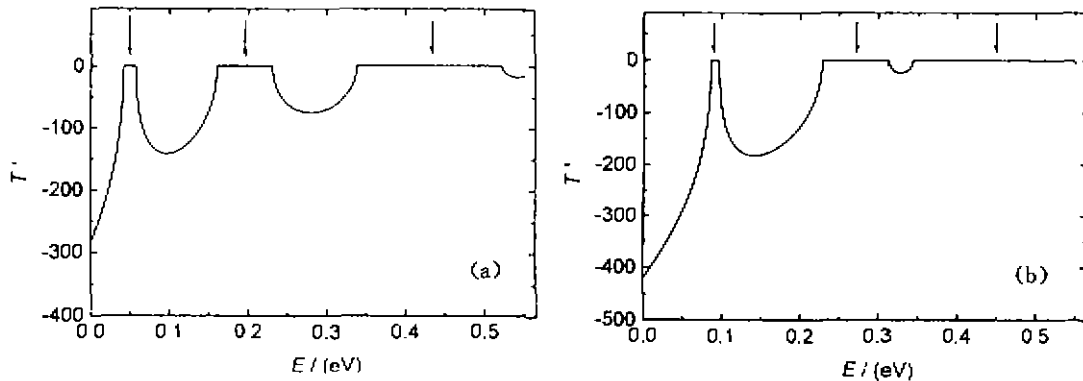


图 2 (a)方势阱超晶格和(b)抛物势阱超晶格中传输系数的对数相对能量的变化  
(GaAs 导带底为能量参考点)

Fig. 2 The logarithm of transmission coefficient (a) composed by square potential, (b) composed by parabolic potential (the bottom of GaAs conduction band is the reference point of energy)

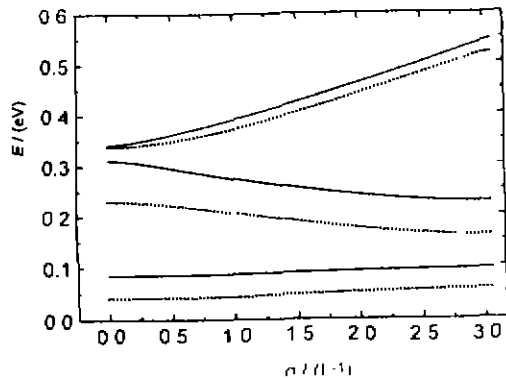


图3 由方势阱超晶格(实线)和由抛物势阱超晶格(虚线)体系的导带中形成的最低能量的三支子带色散关系(GaAs 导带底为能量参考点)  
Fig. 3 The dispersion curves for three lowest conduction subbands for the square potential (dashed line) and parabolic potential (solid line) superlattice (the bottom of GaAs conduction band is the reference point of energy)

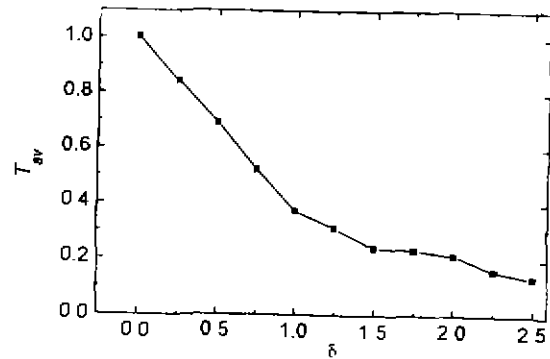


图4 方势阱超晶格在界面出现不同程度的层厚涨落时第一子带平均传递系数  $T_{av}$  的变化  
Fig. 4 The average transfer coefficient of the first subband in square potential superlattice with different interface layer fluctuation

出现层厚的随机起伏.这种随机起伏会对超晶格中的子带特性,特别是子带中电子输运特性带来较大的影响.由于决定电子传输电流密度的最重要因子是传递系数,因此某一子带中的各能级传递系数平均值大小应该反映着该子带中电子的传输特性.当超晶格体系中每个界面都是理想界面,那么任一子带中各个能级的传递系数均为1,所以平均值亦是1.但当各界面上开始出现层厚无序涨落而变得有所局域化,从而传输系数开始变小.这样任一子带内各能级相应的传递系数平均值亦开始变小,图4给出了由前文中方势阱超晶格在界面出现不同程度的层厚涨落时第一子带平均传递系数的变化,图4中的横坐标表示各界面层厚随机涨落量  $\delta$  的最大值.由图4可见涨落小于1个原子层时,传递系数平均值随涨落量上升而迅速下降.而当涨落量大于1个原子层时,传递系数平均值的下降速度放慢,这时传递系数相对完整界面情况下降了近一个数量级.因此超晶格界面的粗糙度对超晶格子带中电子运输的影响还是较大的.

#### 4 结论

我们给出了一种求解任意一维势中薛定谔方程的传递矩阵方法,考虑了解决计算过程中数值溢出问题的途径,从而使这一方法可以用于具有实际器件微米尺度的异质结构系统.另外,由于具有球对称势的薛定谔方程总可转化成一维方程,所以该方法也为这类问题相关实际系统的电子本征能态求解提供了一种途径.这一方法会成为实际器件设计中十分有效的设计工具.

致谢 作者感谢徐文兰和戴宁同志的有益讨论.

## REFERENCES

- 1 *IEEE J. Quantum Electron, Issue for semiconductor and quantum well: physics and application*, QE—22, Sept. 1986
- 2 Ghatak A K, Thyagarajan K, Shenoy M R. *IEEE*, 1988, 24: 1524
- 3 Tan C M, Xue J, Zukotynski S. *et al. J. Appl. Phys.*, 1990, 67: 3011
- 4 Watanabe M O, Yoshida J, Mashifa M. *et al. J. Appl. phys.*, 1985, 57: 5340
- 5 Adachi S, *J. Appl. phys.*, 1988, R1: 58

SOLUTION OF ONE-DIMENTIONAL SCHRÖDINGER EQUATION  
BY TRANSMISSION MATRIX METHOD\*

LU Wei MU Yao-Ming WAN Ming-Fang CHEN Xiao-Shuang LIU Xing-Quan  
DOU Hong-Fei LI Ning SHEN Xue-Chu

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,  
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Center for Advanced Study of Science and Technology of Microstructure, Jiangsu, Nanjing 210093, China)

**Abstract** The application of numerical transmission matrix calculation was reported to solve the bound and quasi-bound states in arbitrary potential of one-dimensional system. Through a numerical decomposition for the  $2 \times 2$  matrix multiplication, this method can be used for the heterostructure system with the size of normal device. The subband characterization of two kinds of superlattice with the size of normal device was analyzed by this method.

**Key words** transmission matrix, one-dimensional potential, subband.

---

\* The project supported by the National Natural Science Foundation for Outstanding Youth Talents and National Natural Science Foundations of China

Received 1997-09-24, revised 1998-02-27