

毕业论文题目:周期无序半导体超晶格GaAs/AlAs光学性质和一维无序系统电子性质的研究

理论物理专业九〇级硕士生姓名:陈效双

指导教师(姓名,职称):熊诗杰,研究员

本文主要研究周期无序半导体超晶格光学性质和一维无序系统的电子性质。全文共分两部分:

第一部分:从有效质量近似出发,在Wannier-Bloch混合表象,我们研究具有随机周期层厚的半导体超晶格GaAs/AlAs的光学性质.用改进的Dean方法,计算了几种不同无序程度样品的能谱和波函数.在此基础上,采用简化的方案,选择几个价带子带和导带子带间的转变,计算出与之联系的光吸收系数.结果表明:随着层厚无序的引进,半导体超晶格GaAs/AlAs的子带微带变宽,能隙变小,光吸收边向红外方向移动,并且吸收峰的峰强变低.

第二部分:考虑特殊的两组元成份的线性联合一维无序系统,用Dean的方法,转移矩阵的方法和Landauer公式,对确定的无序程度,我们可以获得能谱,波函数和平均电阻.结果表明:在能谱中一些特别的峰出现是由于特别的随机出现原子排列.对这样的系统,一些波函数仍然是扩展的,这一结果不同于通常的扩展态在这样的无序系统消失的理论.

THESIS: Optical properties of GaAs/AlAs superlattices with period randomness and electronic properties of one-dimensional disordered system

SPECIALIZATION: Theoretical Physics

POSTGRADUATE: Xiaoshuang Chen

MENTOR: Shijie Xiong

Section one: Optical properties of GaAs/AlAs superlattices with randomly distributed layer thicknesses are studied within the framework of effective-mass approximation in the Wannier-Bloch mixing representation. By use of the improved Dean method, the energy spectra and envelope functions of the carriers in conduction and valence minibands are calculated for several samples with various degrees of randomness. From these results the optical-absorption coefficients of the transitions associated with several valence and conduction minibands are calculated as functions of the photon energy. It is found that the introduction of the randomness in the layer thicknesses gives rise to the reduction of the energy gaps. The calculated absorption edges shift to the infrared side and the intensities of several peaks in the absorption spectrum decrease.

Section two: The electronic properties of a one-dimensional (1D) disordered system are studied with a model describing the linear composition of two binary compounds with random layer thicknesses; the model is studied with Dean's method, the transfer-matrix method, and Landauer's formula. For certain degrees of randomness, the energy spectrum, some wave functions, and the average resistivity are obtained. The appearance of some special peaks in the spectrum is due to a particular arrangement of atoms that occurs randomly. Some wave functions remain delocalized with disorder, contrary to the general theorem on the absence of such states in 1D disordered systems.

## 目 录

第一部分. 具有层状无序半导体超晶格  $GnAs/AsAs$   
光学性质的研究

一. 半导体超晶格的研究现状

二. 层状无序半导体超晶格的构造

三. 基本理论

1. 混合表象 Hamiltonian

2. Dean 的本征值理论

3. 改进 Dean 的方法

四. 电子谱的计算与小结

五. 光吸收系数的计算

1. 光吸收系数的确定

2. 光吸收系数的计算与小结

六. 总结

七. 参考文献

## 第二部分. 一维无序系统电子性质的研究

一. 一维无序系统的研究现状

二. 模型的构造

三. 电子谱和波函数的计算

四、平均电阻的讨论

五、总结

六、参考文献

第一部分. 具有层状无序半导体超晶格  $\text{GaAs}/\text{AlAs}$   
光学性质的研究<sup>[1]</sup>

## 一、半导体超晶格的研究现状

近几年来, 人们对半导体超晶格和量子阱进行了大量的研究。这些材料尤其  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  材料的光学性质 (包括光荧光、光吸收和光散射) 吸引了许多理论工作者和实验工作者的注意<sup>[2-13]</sup>。广泛地讲, 目前可以应用的理论分成两类: 一类是基于紧束缚近似方法, 像 Schulman 和 Chang<sup>[3]</sup> 的经验紧束缚方法; 另一类是  $k \cdot p$  微扰理论方法<sup>[4]</sup>, 像体现  $k \cdot p$  理论的有效质量近似。在当前的文献中, 后者似乎能成功地解释几种半导体超晶格的一些光学性质。实际上, 文献<sup>[14]</sup> 假设电子和空穴为抛物线的带结构, 用 "particle-in-a-box" 模型<sup>[14]</sup>, 已经研究了这些超晶格光吸收谱的普遍性质, 并且给出带间转变的振荡强度为:

$$F_{nn'} \equiv \langle f_n | g_{n'} \rangle \sim F_n S_{nn'}$$

这里  $f_n$  和  $g_{n'}$  分别是第  $n$  导带子带和第  $n'$  价带子

带载流子的波函数，这意味着带间转变主要出现在有相同的主量子数的导带态和价带态之间。

在光学性质方面的研究，Sai-Helsa<sup>[15]</sup>等人基于一个简单的包络函数近似(EFA)，进行了半导体超晶格光吸收系数的理论计算，这样的计算预言了光吸收系数的一般性质，但是它不能解释实验中出现与前述的禁止转变位置相应的几个弱的结构<sup>[16]</sup>。一个更真实的模型已经由Chang和Schulman<sup>[3]</sup>提出。基于此模型，对半导体超晶格，他们计算出子带结构和光学性质，结果揭示了在超晶格势中，重空穴和轻空穴的混合能导致 $\Delta_1$  (禁止)的转变。

在同时，无序对半导体超晶格性质的影响也吸引了一些研究。Dow<sup>[17]</sup>等人已经对一种随机超晶格的电子性质进行了理论研究。最近，原子层掺杂— $\delta$ 掺杂—也变成大量实验的课题，这是因为对组分半导体超晶格，这种掺杂能提供非常高的电子浓度，具有增加低场迁移率的可能性。Betroun和Capasso<sup>[17]</sup>和Zhu<sup>[8]</sup>已经通过插入 $\delta$ 掺杂层进超晶格的阱区或垒区，发现超晶格的带

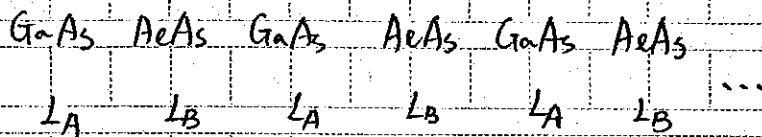
结构大大地被改变。他们也观察到许多重要的性质，其中之一通过引入  $\delta$  掺杂层，子带宽度增大。文献 [8] 和文献 [9] 部分地解释了那些实验结果的原因。最近，Kasu<sup>[10-12]</sup> 等人已经制备了具有随机层厚的半导体超晶格，并可以人为地改变那些材料的无序度。通过对那些材料的光吸收和光质量的测量，他们揭示了这种半导体超晶格的光学性质非常不同于体材料和通常的半导体超晶格材料的光学性质，发现这种无序半导体超晶格的光吸收边移动向红外边方向。

然而到目前为止，有很少理论研究这种具有随机层厚分布的半导体超晶格，主要因为在层方向的无序破坏了周期对称性，Bloch 理论不再合适。Wang<sup>[13]</sup> 等人已经用 recursion 方法计算了非周期超晶格的局部态密度，因为这种方法在计算上具有数值的不稳定，仅之最大和最小的本征值是可靠的，而且这种方法也很难用来计算电子的波函数，因此就难以计算与之相联系的光学性质。

在这篇文章, 我们打算计算具有随机层厚的半导体超晶格  $\text{GaAs}/\text{AlAs}$  的电子性质和光学性质, 因为实验上<sup>[10, 12]</sup> 已经观察到这种材料具有一些不寻常的光学性质, 因此通过对半导体超晶格引进层状无序分布有利于制造一些具有特殊光学性质的新的半导体材料。我们的目的是想研究这种特殊材料结构与物理性质之间的联系, 考虑一定的理论模型得出可以和实验比较的结论。在处理成长方向周期对称破缺问题上, 基于有效质量近似, 我们建立我们的模型在 Wannier-Bloch 混合表象。在成长方向上用 Wannier 紧束缚形式, 在垂直于成长方向的平面内用 Bloch 形式。在这种表象内, 对于一个确定平面动量的问题可以转化该系统成一维无序紧束缚形式, 在这样的一维无序模型, 电子的能谱和包络函数可以用 Dean 的方法<sup>[18, 19]</sup> 计算, 根据计算的结果, 我们能计算这种材料的光吸收性质。

## 二、层状无序半导体超晶格的构造

我们研究的半导体超晶格是通过交替生长两种化合物 GaAs 和 AlAs 而构成的。如果这种超晶格在成长方向上有完全的周期对称性，它们的层排列如下。



这里  $L_A$  ( $L_B$ ) 是层 GaAs (AlAs) 的厚度，所以系统在成长方向上具有一个  $L_A + L_B$  的周期。如果在层厚方向上引进无序，可以让任一特别层的厚度随机变化。这样要求我们建立我们的模型在 Wannier-Bloch 混合表象，选择成长方向为紧束缚形式，因此层厚度只能取在数值，用这个在数值表示一个特定层内的原子平面数。我们可以用下列的随机函数形式来表示层厚度的分布。

$$\begin{aligned} P(L_A) &= \sum_{i=1}^{N_A} P_{A_i} \delta(L_A - l_{A_i}) \\ P(L_B) &= \sum_{i=1}^{N_B} P_{B_i} \delta(L_B - l_{B_i}) \end{aligned} \quad (1)$$

并且：

$$\delta(l) = \begin{cases} 1 & l=0 \\ 0 & l \neq 0 \end{cases}$$

这里  $l_{A_i}$  和  $l_{B_i}$  ( $i=1, 2, \dots, N_{A(B)}$ ) 分别是层厚度  $L_A$  和  $L_B$  的可能值,  $P_{A(B)_i}$  是发现一个特别化合物层  $G_nA_m$  ( $AcAs$ ) 的厚度等于  $l_{A(B)_i}$  的可能性, 明显地有下列表达式.

$$\sum_{i=1}^{N_A} P_{A_i} = 1, \quad \sum_{i=1}^{N_B} P_{B_i} = 1$$

根据上述的分布, 为了产生一个特别的层厚  $L_A$  或  $L_B$ , 我们开始将区间  $[0, 1]$  分成  $N_A$  或  $N_B$  个间隔, 并且第  $i$  个区间间隔的长度与  $P_{A_i}$  或  $P_{B_i}$  成正比, 然后从随机数产生器中取出一个  $X$  值在  $[0, 1]$  范围, 如果  $X$  落在第  $i$  间隔内, 可以认为  $L_A$  或  $L_B$  就是  $l_{A_i}$  或  $l_{B_i}$  的值, 在过超晶格是通过交替生长  $G_nA_m$  和  $AcAs$  层而形成, 并且层厚度依次从上面的过程中产生出来, 因此无序程度可以通过  $P_{A_i}$  和  $P_{B_i}$  的值来控制。如果有:

$$N_A = 1, \quad N_B = 1$$

则无序消失, 系统恢复为周期对称的超晶格。

### 三. 基本理论

#### 1. 混合表象的 Hamiltonian

对于具有随机分布厚度层的半导体超晶格, 电子和空穴是自由地在层平面方向上运动, 相反在成长方向上, 它们的运动强烈地受到层间界面势能不连续的影响和受到层厚度无序的影响, 并且在成长方向没有平移对称性, 因此对这样系统的研究, 取在层平面方向为 Bloch 形式和在成长方向上为 Wannier 形式的 Wannier-Bloch 混合表象是合适的。

我们取这个表象的基函数为  $|k_{\parallel}, \delta\rangle$ , 这里  $k_{\parallel}$  表示动量在层平面方向的投影和  $\delta$  是波函数在成长方向的坐标, 混合表象基函数可以用纯 Wannier 表象的基函数表示, 它们之间有如下的变换:

$$|k_{\parallel}, \delta\rangle = N^{-1/2} \sum_{r_{\parallel}} \exp(i k_{\parallel} \cdot r_{\parallel}) |r_{\parallel}, \delta\rangle \quad (2)$$

这里  $|r_{\parallel}, \delta\rangle$  是在位置  $(r_{\parallel}, \delta)$  处的原子轨道,  $r_{\parallel}$  是在  $x-y$  平面即层方向平面的坐标,  $N$  是单个  $x-y$  平面内的总轨道数, 因此电子和空穴在这种材

料中运动的波函数可以用混合表象基函数的线性联合表示。我们可以写出第  $n$  个导带子带的态函数如下。

$$|4\rangle_{n, \mathbf{k}_n}^e = \sum_{\mathbf{b}} f_n(\mathbf{k}_n, \mathbf{b}) |\mathbf{k}_n, \mathbf{b}\rangle \quad (3)$$

通过代方程 (2) 进方程 (3) 可以推得。

$$|4\rangle_{n, \mathbf{k}_n}^e = N^{1/2} \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'} \exp(i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}_{\mathbf{b}'}) f_n(\mathbf{k}_n, \mathbf{b}) |\mathbf{r}_{\mathbf{b}'}, \mathbf{b}\rangle \quad (4)$$

基于有效质量近似，展开系数  $f_n(\mathbf{k}_n, \mathbf{b})$  (称为包络函数) 满足下列的方程

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m_e(\mathbf{b})} \left[ \mathbf{k}_n^2 - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{b}^2} \right] + V_e(\mathbf{b}) \right\} f_n(\mathbf{k}_n, \mathbf{b}) = E_n^e(\mathbf{k}_n) f_n(\mathbf{k}_n, \mathbf{b}) \quad (5)$$

这里  $E_n^e(\mathbf{k}_n)$  是态  $|4\rangle_{n, \mathbf{k}_n}^e$  的本征能， $V_e(\mathbf{b})$  被看作超晶格中电子的势能， $m_e(\mathbf{b})$  是电子依赖于  $\mathbf{b}$  位于 GaAs 或 AlAs 中的有效质量。一般来说，通过考虑界面的连接条件，方程 (5) 能严格求解。但是，对于我们研究的系统，由于层厚度无序，如果考虑界面的连接条件，用类似于周期超晶格研究方法，将会产生几乎无数的界面连接方程，为了求解包络函数，所有的连接条件都要

考虑。为了克服这种困难，对方程(5)，我们引进一种紧束缚形式，这种形式对求解我们所研究的系统的本征值和包络函数将是有效的。我们可以通过代替方程(5)中的连续变量  $\mathbf{r}$  用一个在  $\mathbf{r}$  方向上具有间距为  $d$  的一维晶格，然后坐标  $\mathbf{r}$  取分立值  $\mathbf{r}_n$  ( $n$  是一个整数)，在方程(5)中的二阶偏导数可用下式表示：

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} f_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{z}) = \frac{f_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{z}+1) + f_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{z}-1) - 2f_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{z})}{d^2} \quad (6)$$

因此我们可以写出方程(5)如下：

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m_e(\mathbf{r}_n)} \left( \mathbf{k}_n^2 + \frac{\mathbf{z}^2}{d^2} \right) + V_e(\mathbf{r}_n) - E_n^e(\mathbf{k}_n) \right] f_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{z}) - \frac{\hbar^2}{2m_e(\mathbf{z}+1)d^2} f_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{z}+1) - \frac{\hbar^2}{2m_e(\mathbf{z}-1)d^2} f_n(\mathbf{r}_n, \mathbf{z}-1) = 0 \quad (7)$$

对于确定的  $\mathbf{r}_n$ ，方程(7)是一个三对角矩阵方程。

类似地，第  $m$  个价带子带态也可以写成如下形式：

$$|4\rangle_{m, \mathbf{r}_n}^v = \sum_{\mathbf{z}} \exp(i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}_n) g_m^v(\mathbf{r}_n, \mathbf{z}) |F_{n, \mathbf{z}}\rangle \quad (8)$$

这里  $\nu = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$  是价带子带的量子数 ( $\nu = \frac{3}{2}$  相应于重空穴带和  $\nu = \frac{1}{2}$  相应于轻空穴带)。

根据有效质量近似,  $g_m^{\nu}(\mathbf{k}_1, \nu)$  满足下列的方程:

$$\sum_{\nu'} [H_{\nu, \nu'}^h(\mathbf{k}_1, \delta) + E_{m, \nu'}^h(\mathbf{k}_1)] \delta_{\nu, \nu'} g_m^{\nu'}(\mathbf{k}_1, \delta) + V_h^{\nu}(\delta) g_m^{\nu}(\mathbf{k}_1, \delta) = 0 \quad (9)$$

这里  $V_h^{\nu}(\delta)$  看作为超晶格中空穴势能,  $H_{\nu, \nu'}^h(\mathbf{k}_1, \delta)$  是描述体超晶格价带五带结构的 Luttinger-Kohn Hamiltonian<sup>[25]</sup> 的矩阵元和  $E_{m, \nu}^h(\mathbf{k}_1)$  是相应态的本征值。因为我们的着重点主要是研究无序的效应, 作为近似计算的第一步, 忽略重空穴和轻空穴成份的混合, 所以 Luttinger-Kohn Hamiltonian 的非对角矩阵元消失, 四个五带 ( $\nu = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ ) 是非耦合的。我们能写出第  $\nu$  个五带的第  $m$  子带态的方程为:

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m_h^{\nu}(\delta)} \left( k_{\parallel}^2 + \frac{2}{d^2} \right) + V_h^{\nu}(\delta) \right] g_m^{\nu}(\mathbf{k}_1, \delta) = E_{m, \nu}^h(\mathbf{k}_1) g_m^{\nu}(\mathbf{k}_1, \delta) \quad (10)$$

这里用类似于处理导带子带的方法, 我们可以转变方程 (10) 为如下形式:

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m_h^{\nu}(\delta)} \left( k_{\parallel}^2 + \frac{2}{d^2} \right) + V_h^{\nu}(\delta) - E_{m, \nu}^h(\mathbf{k}_1) \right] g_m^{\nu}(\mathbf{k}_1, \delta) - \frac{\hbar^2}{2m_h^{\nu}(\delta)d^2} g_m^{\nu}(\mathbf{k}_1, \delta) = 0 \quad (11)$$

对于一个确定  $\vec{b}$ , 方程 (11) 也是一个三对角矩阵方程, 对于这些三对角矩阵方程, 我们可以用 Dean<sup>[18]</sup> 的负本征值理论和改进 Dean<sup>[19]</sup> 方法求解能谱和包络函数。

## 2. Dean 的负本征值理论

早在 1960 年, 负本征值理论<sup>[20]</sup> 已经在处理一维无序系统晶格振动的问题中显示出较强的适用性。

这一理论主要考虑下列的分块矩阵

$$\hat{M} = \begin{bmatrix} \hat{A}_1 & \hat{B}_2 & & 0 \\ & \hat{B}_2^T & \hat{A}_2 & \hat{B}_3 \\ & & \cdot & \cdot \\ 0 & & & \hat{B}_m^T & \hat{A}_m \end{bmatrix} \quad (12)$$

这里  $\hat{A}_i$  是一个  $L_i$  阶方阵,  $\hat{B}_i$  是  $(L_{i-1} \times L_i)$  阶矩阵,  $\hat{B}_i^T$  是  $\hat{B}_i$  的转置矩阵,  $\hat{M}$  中除  $\hat{A}$  和  $\hat{B}$  子矩阵外, 所有其它矩阵元都为 0。负本征值理论认为, 如果  $\lambda$  用来表示矩阵  $\hat{A}$  的实负本征值数, 可以推得,

$$\eta \{ \hat{M} - x \hat{I} \} = \sum_{i=1}^m \eta \{ \hat{U}_i \} \quad (13)$$

$$\text{这里 } \hat{U}_i = \hat{A}_i - x \hat{I}_i - \hat{B}_i^T \hat{U}_{i-1} \hat{B}_i \quad (i=2, 3, \dots, m)$$

$$\hat{U}_1 = \hat{A}_1 - x \hat{I}_1$$

$$\text{当然 } \sum_{i=1}^m l_i = n$$

其中  $\hat{I}_i$  是  $l_i$  阶单位矩阵,  $\hat{I}$  是  $n$  阶单位矩阵。

考虑我们所研究的系统,  $\hat{M}$  矩阵为一简单的特殊形式三对角矩阵, 即  $\hat{A}_i$  和  $\hat{B}_i$  ( $i=1, 2, \dots, m$ ) 均为标量。对于第  $n$  个导带子带情况,

$$A_e = \frac{\hbar^2}{2m_e(l)} \left[ k_{||}^2 + \frac{\pi^2}{d^2} \right] + V_e(l)$$

$$B_e = \frac{\hbar^2}{2m_e(l) d^2}$$

同样对第  $\nu$  个导带的第  $m$  子带情况有:

$$A_e = \frac{\hbar^2}{2m_e^\nu(l)} \left[ k_{||}^2 + \frac{\pi^2}{d^2} \right] + V_e^\nu(l)$$

$$B_e = \frac{\hbar^2}{2m_e^\nu(l) d^2}$$

因此, 可以根据  $\eta \{ U_i \}$  的符号来确定  $\eta \{ \hat{M} - x \hat{I} \}$  的本征值 ( $U_i = A_i - x - B_i U_{i-1}$ ,  $B_i$  为标量), 方程 (13) 可以有效地确定本征谱。由此可以看出一个实

对称矩阵的本征值比实数  $\lambda$  小的数目可以通过从几个标量数  $A, -X - B, U, -B$  的符号来确定。负本征值理论的证明见附录。

### 3. 改进的 Dean 方法

Dean 的本征值理论适合计算一个实对称矩阵的本征值和态密度，若用来计算本征矢反复迭代非常费时间。近来 Zhang [19] 等人已经发展了计算分块三对角 Hamiltonian 本征矢的方法。若三对角分块矩阵形式为：

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} & & 0 \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} & \hat{A}_{23} & \\ & & \ddots & \ddots \\ 0 & \hat{A}_{m-1} & \hat{A}_m & \end{bmatrix} \quad (14)$$

其中  $\hat{A}_{ij}$  是  $n_i$  阶方阵， $i, j = 1, 2, \dots, m$ ，且  $\sum_{i=1}^m n_i = N$ 。

对于第  $j$  个本征值  $E_j$ ，可以通过下列方法确定本征态。

$$\hat{H} u_j = E_j u_j \quad (15)$$

其中,

$$u_j = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \quad \text{和} \quad b_i = \begin{bmatrix} b_{i1} \\ \vdots \\ b_{in_i} \end{bmatrix}$$

如果  $b_k \neq 0$ , 我们有,

$$\hat{A}_{k,k+1} b_{k+1} + (\hat{A}_{k,k} - E_j \hat{I}_k) b_k + \hat{A}_{k,k-1} b_{k-1} = 0$$

并且可以得到  $b_k$  与  $b_{k \pm r}$  的关系为,

$$b_{k \pm 1} = -\hat{\Delta}_{k \pm 1}^{\pm} \hat{A}_{k \pm 1, k} b_k$$

$$b_{k \pm 2} = -\hat{\Delta}_{k \pm 2}^{\pm} \hat{A}_{k \pm 2, k \pm 1} b_{k \pm 1}$$

$$\vdots$$

$$b_m = -\hat{\Delta}_m^{\pm} \hat{A}_{m, m-1} b_{m-1}$$

(16)

且:

$$\hat{\Delta}_i^{\pm} = 1 / (\hat{A}_{i,i} - E_j \hat{I}_i - \hat{A}_{i,i \pm 1} \hat{\Delta}_{i \pm 1}^{\pm} \hat{A}_{i \pm 1, i}) \quad (17)$$

一旦  $b_k$  给定, 由方程组(16)可以计算  $b_{k \pm r}$  ( $r=1, 2, \dots$ )

根据我们所要研究的系统,  $\hat{A}$  中的矩阵元  $\hat{A}_{ij}$  均为标量数,  $b_k$  即为一维向量。因此, 如果取  $b_k = 1$ , 由方程(16)可求得  $b_{k \pm r}$  ( $r=1, 2, \dots$ ), 即可求得  $E_j$  所对应的本征态。

#### 四、电子谱的计算与小结

为了应用负本征值理论到我们所研究的模型，我们考虑一个有限样品具有  $M$  个格点在一维方程 (7) 和 (11) 中，随机层厚度可以通过方程 (1) 来确定。对于一确定的格点，势能和电子或空穴的有效质量可根据格点位于 GaAs 和 AlAs 中的位置来确定。对于一确定层，我们研究的模型变为一维无序链，可以由负本征值理论来计算能谱。在我们的计算中，我们选取 GaAs 和 AlAs 的参数值与文献 [21] 使用的参数一致。

$$\text{GaAs: } E_g = 1.43 \text{ eV, } m_{lh} = 0.34 m_0, m_{eh} = 0.09 m_0, m_c = 0.067 m_0$$

$$\text{AlAs: } E_g = 2.95 \text{ eV, } m_{lh} = 0.76 m_0, m_{eh} = 0.137 m_0, m_c = 0.15 m_0$$

取体材料 GaAs 和 AlAs 带隙差的百分之四十为空穴势能，取带隙差的百分之六十为电子势能<sup>[22]</sup>。

在一维方程 (7) 和 (11) 中，取格点总数为 5000，并计算  $k_x = 0$  时的能谱。图 1, 2 和 3 分别给出了计算出的电子微带、重空穴和轻空穴微带的态密度相应于不同的无序层厚度。

从图中可以看到，当无序层厚度大时，微带

的总宽度增大，并且能隙减小，这一结论类似于文献 [7.8] 中杂质获得的结论。

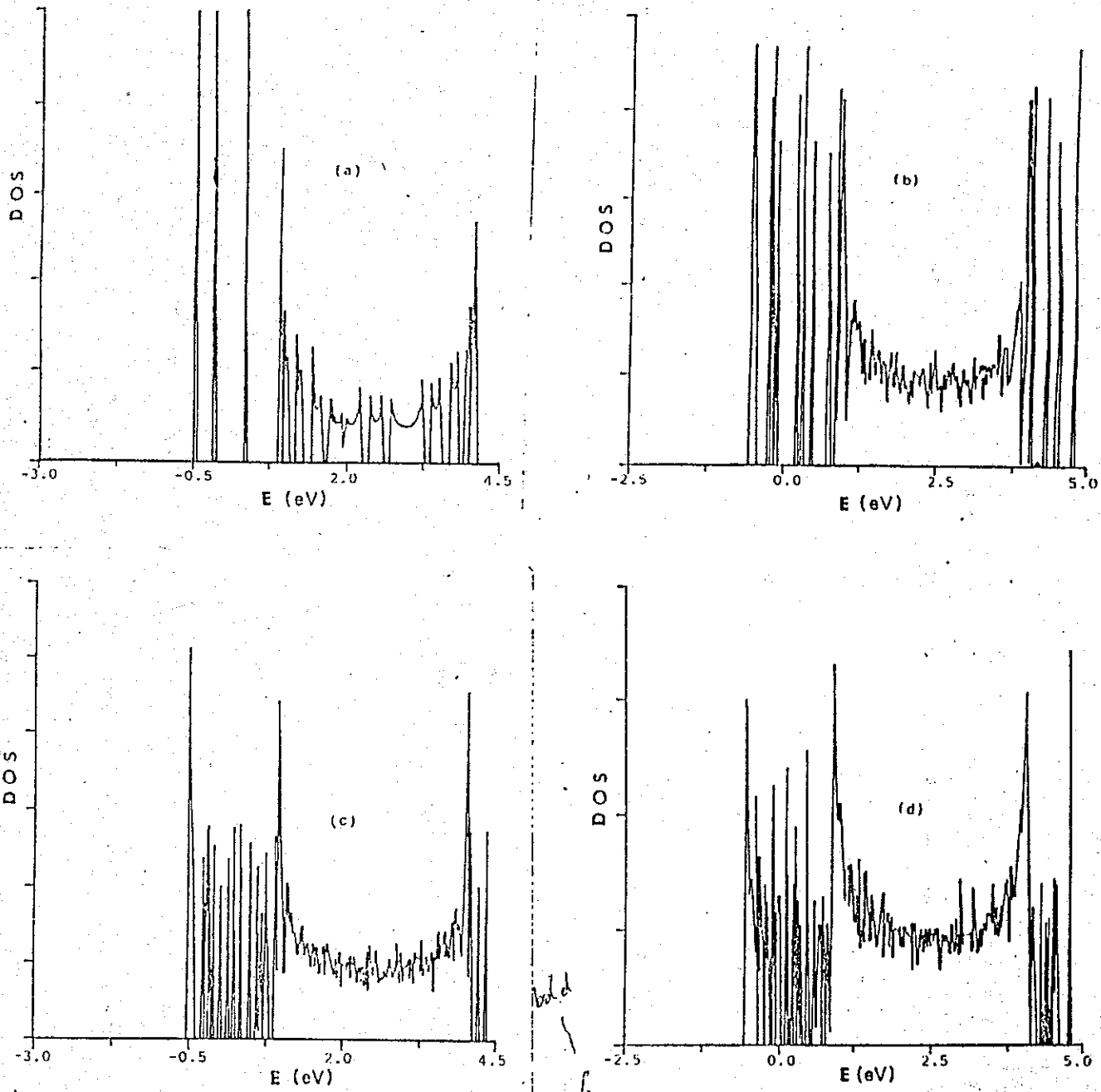


FIG. 1. Density of states (DOS) of conduction minibands with  $k_z=0$  in a finite system with 5000 sites in the  $z$  direction. The parameters in Eq. (1) are (a)  $N_A=N_B=1$ ,  $p_{A1}=p_{B1}=1$ , and  $l_{A1}=l_{B1}=10$ ; (b)  $N_A=N_B=3$ ,  $p_{A1}=p_{B1}=p_{A3}=p_{B3}=\frac{1}{10}$ ,  $p_{A2}=p_{B2}=\frac{1}{10}$ ,  $l_{A1}=l_{B1}=9$ ,  $l_{A2}=l_{B2}=10$ , and  $l_{A3}=l_{B3}=11$ ; (c)  $N_A=N_B=5$ , and  $p_{A1}=p_{B1}=\frac{1}{5}$  for  $i=3$  and for  $i \neq 3$ , where  $l_{A1}=l_{B1}=i+7$ ; (d)  $N_A=N_B=11$ , and  $p_{A1}=p_{B1}=\frac{1}{11}$  for  $11 \geq i \geq 1$ , and  $l_{A1}=l_{B1}=i+4$ .

$\frac{1}{10}$

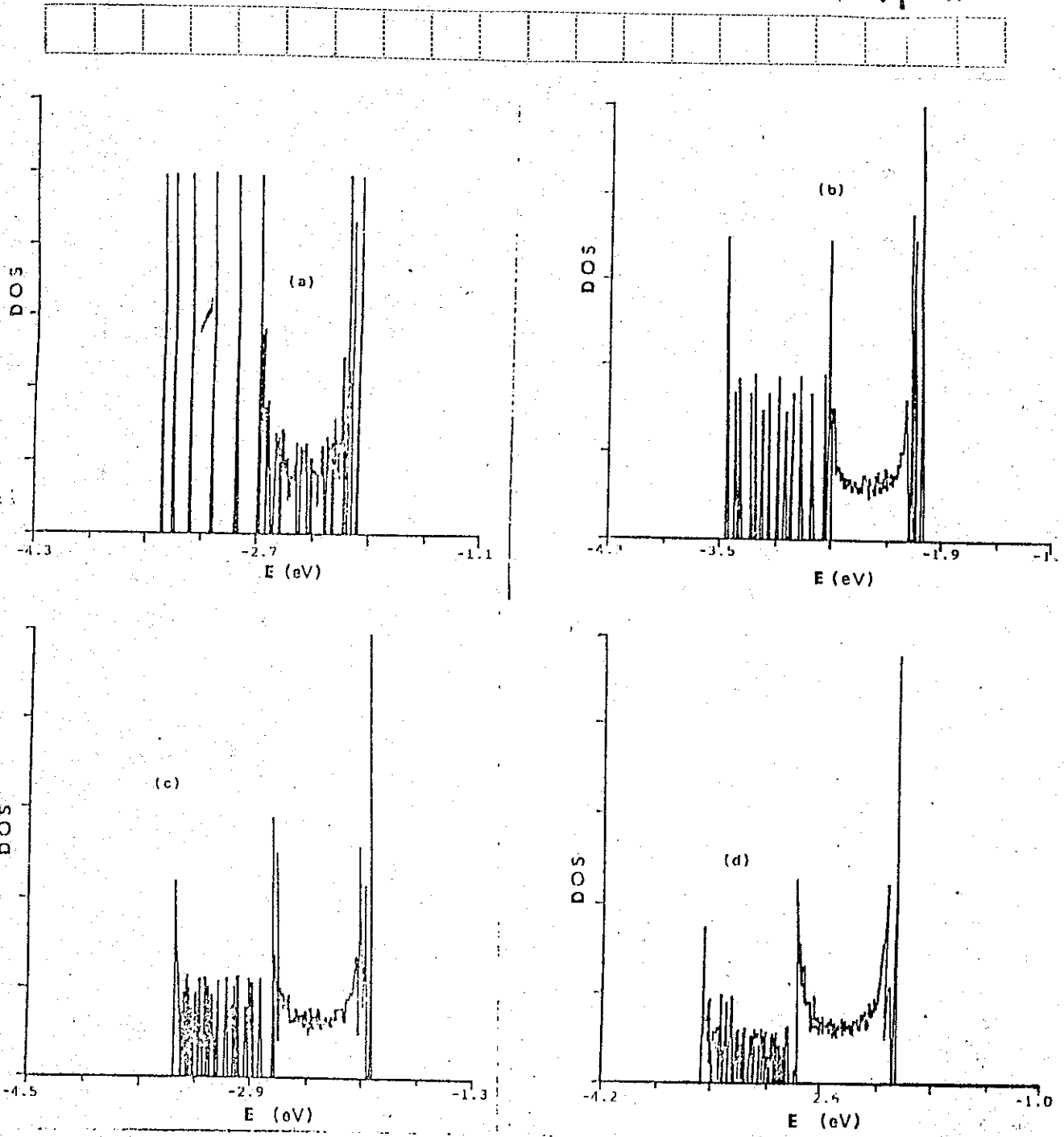


FIG. 2. Density of states of heavy-hole minibands with  $k_{\parallel}=0$  in a system with 5000 sites in the z direction. The parameters are the same as those of Fig. 1.

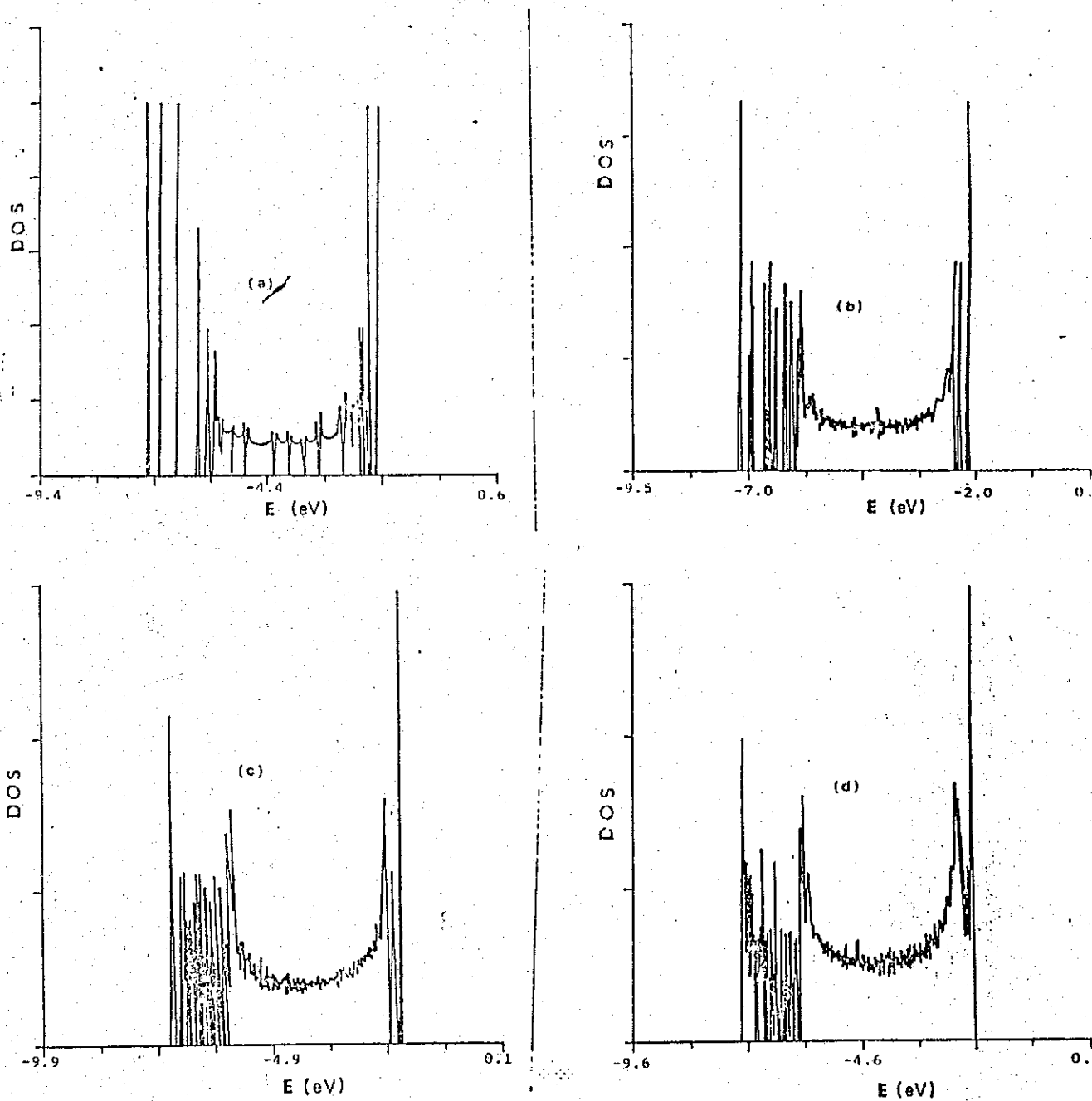


FIG. 3. Density of states of light-hole minibands in the same system as that depicted in Figs. 1 and 2.

## 五. 光吸收系数的计算

### 1. 光吸收系数的确定

这里我们主要研究的光学性质为半导体超晶格带间的光吸收系数，并且为了研究光吸收系数获得的光学矩阵元对其它的光学性质如光荧光和光导的研究也将是有用的。

除掉常数部分，半导体超晶格的光吸收系数<sup>[3]</sup>为：

$$\alpha(\hbar\omega) = (\hbar\omega)^{-1} \sum_{E_n, n, n'} |\hat{\epsilon} \cdot \vec{P}_{nn'}(E_n)|^2 \delta(E_n(E_n) - E_n(E_n) - \hbar\omega) \quad (18)$$

其中  $\hat{\epsilon}$  为单位极化方向和  $\vec{P}_{nn'}(E_n)$  是能量为  $E_n$  的第  $n$  个导带态和能量为  $E_n$  的第  $n'$  价带态之间的光学矩阵元。在我们的模型中，我们可以用包络函数  $f_n$  和  $g_{n'}$  以及混合表象基函数间的动量矩阵元来表示光学矩阵元，即：

$$\vec{P}_{nn'}(E_n) = \sum_{\beta\beta', \alpha\alpha'} f_n^+(\vec{k}_n, \beta, \alpha) g_{n'}(\vec{k}_n, \beta', \alpha') \langle \vec{k}_n, \beta, \alpha | \vec{p} | \vec{k}_n, \beta', \alpha' \rangle \quad (19)$$

因为原子轨道充分地局域，超出最近邻间距的原子之间的动量矩阵元可以忽略不计，因此动

量矩阵元  $\langle k, s, \alpha | \hat{p} | k', s', \alpha' \rangle$  受超晶格界面的影响不大，几乎可以用半导体的体动量矩阵元来表示，像文献 [23] 中描述的那样。

在这篇文章中，我们主要考虑子带边间转变的光吸收来估计层厚度无序的效应。这意味着我们仅仅需要考虑  $k_z = 0$  时态对光吸收的贡献即可，因此光吸收系数可以变为：

$$\alpha(\hbar\omega) = (\hbar\omega)^{-1} \sum_{nn'} |\hat{z} \cdot \hat{p}_{nn'}(0)|^2 f_{nn'}(\hbar\omega) \quad (20)$$

这里  $f_{nn'}(\hbar\omega)$  是第  $n$  导带子带与第  $n'$  价带子带的联合态密度，在文献中，这个近似的光吸收系数表达式经常被应用，它能合理描述光吸收谱的特征。

对于一个给定的极化方向入射光，我们可以建立带间转变的选择定则。如果入射光极化在  $z$  方向，仅仅可能有轻空穴和导带态之间的转变存在。否则，如果光极化在  $x$  或  $y$  方向，则有导带态和轻空穴或重空穴态之间的转变存在。在目前的讨论中，我们认为光的极化矢量平行于  $x$  方向，在这种情况下，与重空穴态和

导带态之间的动量矩阵元有关的振荡强度是轻空穴和导带态之间的振荡强度的3倍，在文献[3]中，根据价带的自旋轨道耦合态的点群对称性，给出上述的振荡强度之间的关系。

## 2. 光吸收系数的计算与小结

根据上述的讨论，我们计算出具有不同无序度厚度的半导体超晶格的光吸收谱，计算结果见图4。在我们的计算中，我们还发现对光吸收的贡献主要来自于服从 $\Delta n=0$ 选择定则的带间转变。事实上，由于半导体超晶格看作电子和空穴的势能具有同样的无序结构，因此具有相同主量子数的电子态和空穴态的波函数几乎有同样的空间结构和大部分是叠加的。这样来自那些态间的转变对光吸收的贡献当然是主要的。这也正是这种无序结构材料的一个奇特的结构性质。从图4中，我们还可以看到，当无序度增大时，在吸收谱中的峰变得更窄和光吸收边向长波方向移动，它一致反验<sup>[10-12]</sup>的结论。

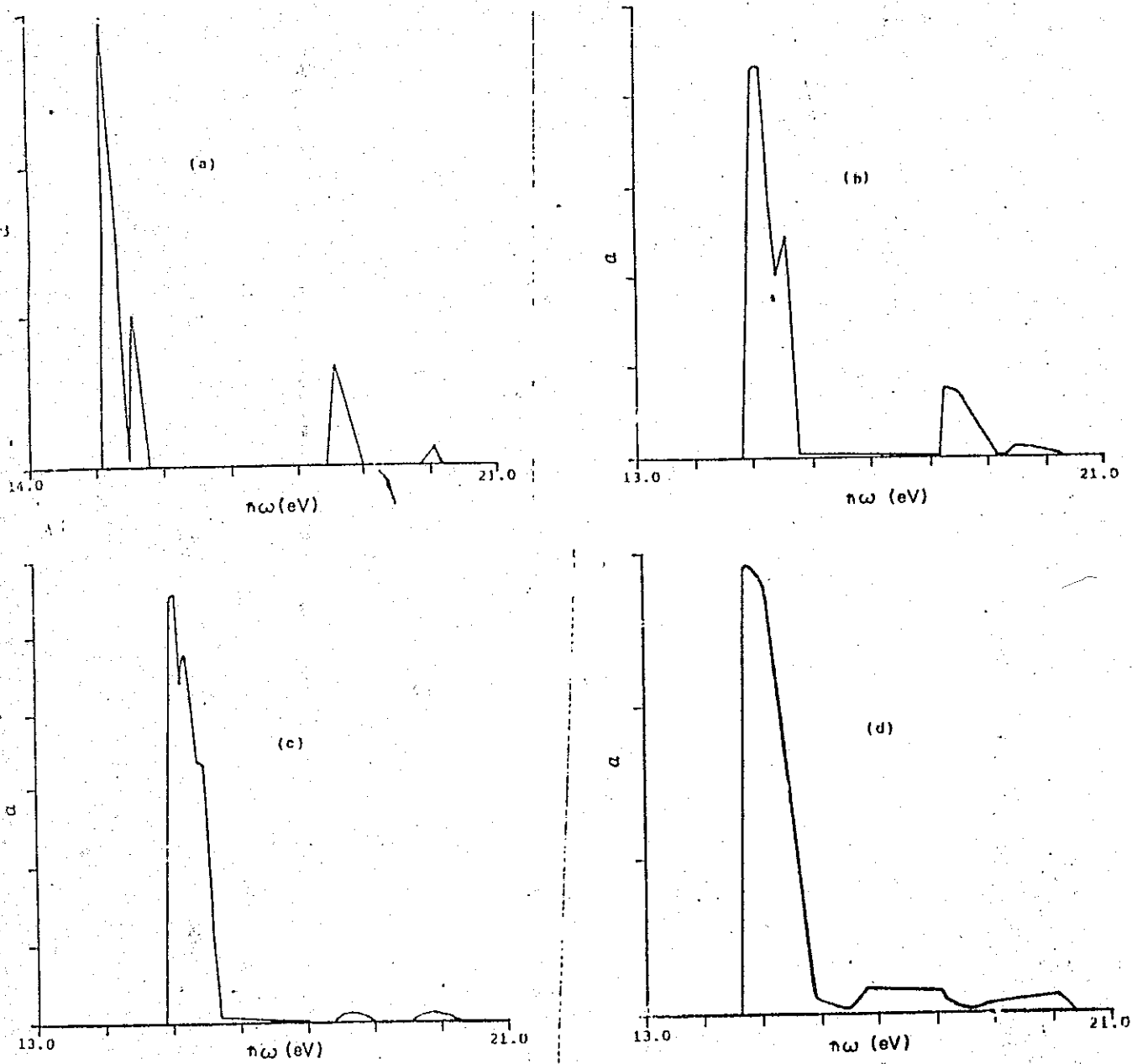


FIG. 4. Optical-absorption spectra for different degrees of randomness. The parameters of randomness are the same as those in Figs. 1(a)–1(d).

## 六、总结

我们已经研究了具有随机层厚度的半导体超晶格 GaAs/AlAs 的电子性质和光学性质。为了解决层方面的对称破缺困难，用有效质量近似，我们建立 Hamiltonian 在 Wannier-Block 混合表象，在成长方向用紧束缚形式表示，在  $x-y$  平面内，用 Bloch 形式，因此对一个给定层，研究的模型可以化简为一维无序晶格问题。对几种不同层厚无序的样品，用负本征值理论和改进 Dean 的方法，我们可以获得能谱和包络函数。通过一个简化的方案，我们计算出子带边的光吸收谱。由计算可知，对具有不同无序度的样品可以看到，当无序度增大，微带的宽度增宽，能隙变小，光吸收峰变低和吸收边向长波方向移动，这些结论定性的一致与实验<sup>[10-12]</sup>。这种独特无序的结构特性使得我们有可能制造一些新的半导体元件和光元件。更进一步的工作<sup>[24]</sup>，我们研究了这种材料带结构的非抛物性以及价带混合对带结构的影响，也给出定性一致实验的结论。

## 附录. 复本征值理论的证明

我们写出矩阵  $M - \lambda I$ , 其中  $M$  是 (12) 形式的分块矩阵, 当分解为上三角和下三角矩阵乘积时, 则有.

$$M - \lambda I = \hat{L}(\lambda) \cdot \hat{U}(\lambda) \quad (A_1)$$

其中,

$$\hat{L}(\lambda) = \begin{pmatrix} \hat{I}_{l_1} & 0 & & 0 \\ \hat{L}_2 & \hat{I}_{l_2} & & 0 \\ & \hat{L}_3 & \hat{I}_{l_3} & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \hat{L}_m & \hat{I}_{l_m} \end{pmatrix} \quad (A_2)$$

和

$$\hat{U}(\lambda) = \begin{pmatrix} \hat{U}_1 & \hat{V}_1 & & 0 \\ 0 & U_2 & V_2 & \\ & 0 & U_3 & V_3 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & 0 & U_m \end{pmatrix} \quad (A_3)$$

在每一种情况, 分块矩阵一致于  $M$  的分块,  $\hat{I}_{l_j}$  是阶为  $l_j$  的单位矩阵 (也就是  $\hat{I}_{l_j}$  的阶)。块矩阵  $\hat{I}_{l_j}$ ,  $\hat{L}_j$ ,  $\hat{U}_j$  和  $\hat{V}_j$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) 包含  $L(\lambda)$  和  $U(\lambda)$

所有的非零矩阵元。

应用分块矩阵乘法在  $(A_1)$  的右边导致下列的关系：

$$\hat{A}_1 - x\hat{I}_1 = \hat{U}_1$$

$$\hat{A}_j - x\hat{I}_j = \hat{L}_j\hat{U}_j + \hat{U}_j$$

$$\hat{B}_j = \hat{V}_j$$

$$\hat{B}_j^T = \hat{L}_j \hat{V}_{j-1} \quad (j=2, 3, \dots) \quad (A_4)$$

因此，如果  $\hat{U}_{j-1}$  是非奇异的，

$$\hat{U}_j = \hat{A}_j - x\hat{I}_j - \hat{B}_j^T \hat{U}_{j-1}^{-1} \hat{B}_j,$$

(A5)

$$\hat{U}_1 = \hat{A}_1 - x\hat{I}_1.$$

从  $(A_1)$  和  $L(x)$  的结构，我们注意到  $\hat{U}(x)$  的领先的主要子矩阵与  $\hat{M} - x\hat{I}$  的一致。根据 Jeffreys<sup>[26]</sup> 理论，一个对称矩阵的本征值数基于连续的领先主要子矩阵之间符号变化数（初始第零级子矩阵（行列式）作为正的）。因此符号变化总数基于：

$$\sum_{j=1}^m \eta\{\hat{U}_j\}$$

因此，根据上述理论，我们有

$$\eta[M - x_i] = \sum_{j=1}^m \eta[u_j] \quad (A_6)$$

## 七. 参考文献

- [1] Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, *Phys. Rev.* B47, (March 1993)  
to be published.
- [2] D. C. Reynolds, K. D. Merkel, and C. Z. Stutz, *Phys. Rev.* B43,  
1604 (1991).
- [3] J. N. Schulman and Y. C. Chang, *Phys. Rev.* B31, 2056 (1985);  
Y. C. Chang and J. N. Schulman, *ibid.* 31, 2069 (1985).
- [4] D. L. Smith and C. Mailhot, *Rev. Mod. Phys.* 62, 173 (1990).
- [5] S. Schmitt-Rink, D. S. Chemla, and D. A. B. Miller, *Adv. Phys.*  
38, 1 (1989).
- [6] S.-L. Chang, S. R. Stefan, and D. A. B. Miller, *Phys. Rev.* B43, 1500  
(1991).
- [7] F. Betram and F. Capasso, *Phys. Rev.* B38, 3580 (1988).
- [8] G. Ihm, S. K. Noh, J. I. Lee, and J. S. Hwang, *Phys. Rev.* B44,  
6266 (1991).
- [9] C. J. Arsenault and M. Meunier, *Phys. Rev.* B39, 8739 (1989).
- [10] M. Kasu, T. Yamamoto, S. Noda, and A. Sasaki, *Jpn. J. Appl. Phys.*  
29, 828 (1990).
- [11] T. Yamamoto, M. Kasu, S. Noda, and A. Sasaki, *J. Appl. Phys.*  
68, 5318 (1990).

- [12] A. Sasaki (unpublished).
- [13] E.-G. Wang, L.-Y. Zhang, and H.-Y. Wang, *J. Phys. Condensed Matter* **1**, 8065 (1989).
- [14] A. C. Gossard, P. M. Petroff, M. Wiegman, R. Dingle, and A. Savage, *Appl. Phys. Lett.* **29**, 323 (1979).
- [15] G. A. Sai-Halasz, L. L. Chang, J. M. Welter, C. A. Chang, and L. Esaki, *Solid State Commun.* **27**, 935 (1978).
- [16] R. C. Miller, D. A. Kleinman, W. A. Nordland, Jr., and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **22**, 863 (1980), C. Weisbuch, R. C. Miller, R. Dingle, A. C. Gossard, and W. Wiegman, *Solid State Commun.* **37**, 219 (1980).
- [17] J. Dow, S.-Y. Ren, and K. Hess, *Phys. Rev. B* **25**, 6218 (1982).
- [18] P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).
- [19] Z.-B. Zheng, *J. Phys. C* **19**, L689 (1986).
- [20] P. Dean, and J. L. Martin, *Proc. Roy. Soc. A* **259**, 409 (1960); P. Dean, and J. L. Martin, *Proc. Roy. Soc.* **65**, 452 (1960).
- [21] J. A. Brum, P. Voisin, and G. Bastard, *Phys. Rev. B* **33**, 1063 (1986).
- [22] R. C. Miller, D. A. Kleinman, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **29**, 7085 (1984), M. H. Meunodier, C. Delalande, G. Bastard, M. Vos, F. Alexandre and J. L. Lievin, *Phys. Rev. B* **31**, 5539 (1985).
- [23] C. Weisbuch and J. Nagle, *Phys. Scr. T* **19**, 209 (1987); C. Weisbuch,

Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices, edited by

E.E. Mendez and K. von Klitzing, NATO ASI Series, 170, 261 (1987)

[24] Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, Phys. Rev. B, Accepted.

[25] M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1956).

[26] Jeffreys, H., and B. S. Jeffreys, Method of Mathematical Physics (Cambridge U. P., Cambridge), p. 140 (1950).

## 第二部分，一维无序系统电子性质的研究<sup>[1]</sup>

### 一、一维无序系统的研究现状

一维准周期系统尤其电子态的局域性质已经吸引大量的注意<sup>[2-8]</sup>。同时，人们对一维无序系统也进行了大量研究。根据 Anderson 的标度理论<sup>[9]</sup>，一维无序系统电子态总是局域的。然而，近来 Dunlap<sup>[10]</sup> 等人发现一特殊类型的无序系统情况不是那样，他们证明在一维随机二聚物模型中存在扩展态。Dunlap<sup>[11]</sup> 等人和 Flores<sup>[12]</sup> 也发现扩展态出现在某一确定无序的任一空间维度的晶格中。在这篇文章中，我们提出另一种一维无序模型，这一模型是通过具有随机长度的两链元化合物的线性联合而成。因为与前述实验<sup>[13]</sup> 对具有人为随机层厚的 GaAs/AlAs 超晶格的研究显示一些特殊的性质，因此作为一种简化的模型，我们将超晶格在成长方向上的结构简化为一维无序系统，目的是研究一些电子态的性质。

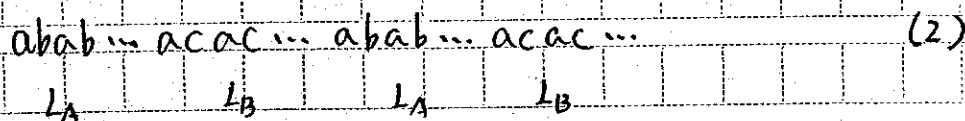
### 二、模型的构造

在这篇文章中，我们用紧束缚 Hamiltonian

$$H = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} E(n) |n\rangle\langle n| + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (t |n\rangle\langle n+1| + t |n\rangle\langle n-1|) \quad (1)$$

来描述一维电子系统，其中  $|n\rangle$  表示第  $n$  个格点的 Wannier 态， $E(n)$  是与之相联系的能量， $t$  是最近邻的交迭积分。我们研究的模型是通过交替连接两种化合物 A 和 B 而构成的。A 内含有元素 a 和 b，排列为， $abab\dots$ ；B 为  $acac\dots$ ，其中 c 是另一种元素。能量  $E(n)$  可取  $E_a$ ， $E_b$  和  $E_c$  中的值，取决于第几个原子种类。

对一周期链，原子排列如下。



其中  $L_A$  和  $L_B$  分别是 A 层和 B 层的长度，周期是  $L_A + L_B$ ，通过引进随机层厚， $L_A$  和  $L_B$  变成随机变化，它们的涨落可由下列随机函数表示，

$$P(L_A) = \sum_i P_{A_i} \delta(L_A - i) \quad (3)$$

$$P(L_B) = \sum_i P_{B_i} \delta(L_B - i)$$

其中，

$$S(l) = \begin{cases} 1 & l=0 \\ 0 & l \neq 0 \end{cases}$$

和  $P_{A(B)}(i)$  是发现一层化合物 A (B) 有  $i$  原子的可能性。从这个分布,  $L_A$  和  $L_B$  的大小, 可随机产生, 在一个一维晶格则是通过交替连接具有随机层厚的化合物而成。

### 三. 电子谱和波函数的计算

为了研究不同无序程度对晶格电子谱和电子态的影响, 在方程 (3), 我们选取不同的参数构造了若干有限的原子链, 每个链中有  $N$  个原子。用 Dean<sup>[14]</sup> 的方法, 我们获得的态密度见图 1。比较无序链和周期链的结果可以看出, 对具有无序的链, 有两个明显的峰分别在  $E=0.75$  和  $E=-2.25$ 。根据对这种系统的结构分析可以看出, 这种峰是由 aa 原子团产生的, 这种原子团在我们研究的周期系统中不存在, 因而这两个峰不出现在周期性系统。当无序度增大, 更多的结构出现在能谱中。

为了计算波函数, 我们用改进 Dean<sup>[15,16]</sup> 的方

法来计称一给定无序度链的两种波函数见图 2。从图 2 可见，图 2(a) 的态显然是局域的，然而图 2(b) 的态似乎是非局域的，因此我们也得出类似于文献 [10-12] 获得的无序律结论。

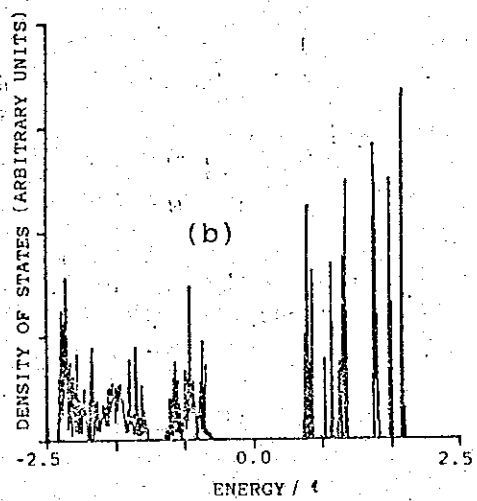
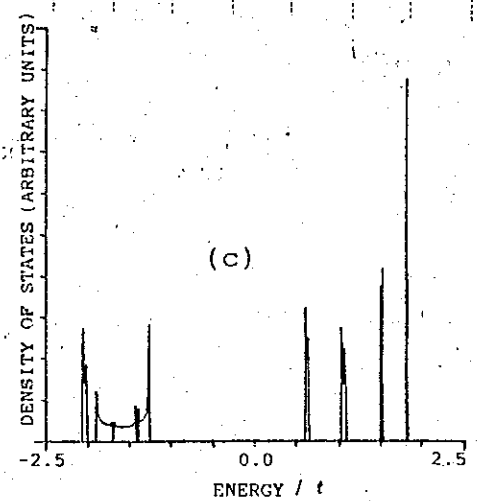
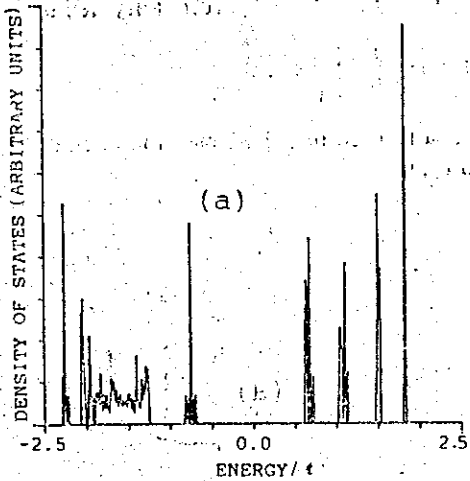


FIG. 1. Energy spectrum of 1D model in text with 5000 atoms. The parameters in Eq. (3) are

$$\begin{aligned}
 \text{(a) } \rho_{Ai} = \rho_{Bi} &= \begin{cases} 0.75, & \text{for } i=4, \\ 0.25, & \text{for } i=3, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \\
 \text{(b) } \rho_{Ai} = \rho_{Bi} &= \begin{cases} 1/3, & \text{for } 5 \geq i \geq 3 \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \\
 \text{(c) } \rho_{Ai} = \rho_{Bi} &= \begin{cases} 1, & \text{for } i=4 \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}
 \end{aligned}$$

#### 四、平均电阻的计称

为了更进一步证实这一结论，我们用 Landauer 公式 [17] 和转移矩阵方法 [18] 来计称无量纲的电阻。

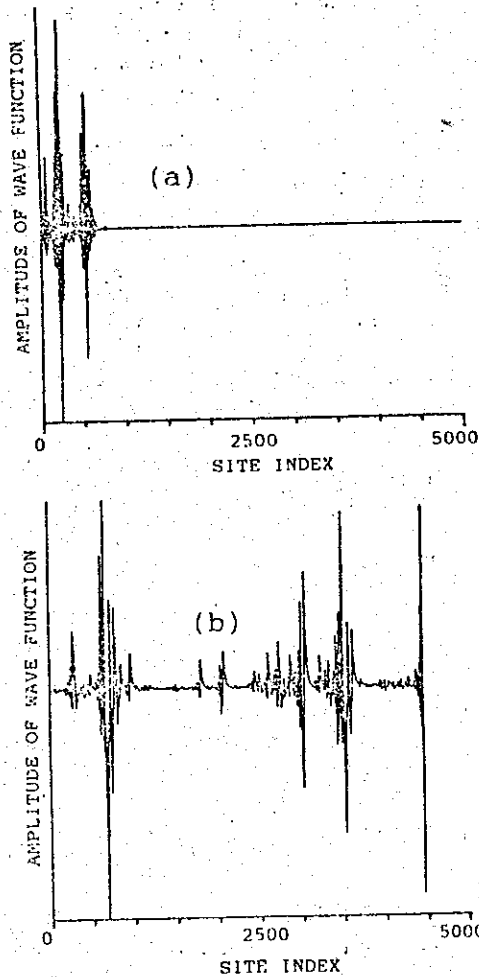


FIG. 2. Two wave functions of a random chain. The parameters of randomness are the same as those of Fig. 1(a). The corresponding eigenvalue is (a)  $E = -1.9820t$ , (b)  $E = -1.9851t$ .

因为电阻是价局域性的一个可靠的量，并且原则上能被实验检验，因此已经由许多作者<sup>[6,7,8]</sup>用这一方法来研究无序系统和无公度一维系统的电子性质。首先，我们将含  $N+1$  个原子的一维无序链插入一无限长的且没有无序的链中。若取  $t=1$ ，则具有本征值  $\epsilon$  的

波函数振幅在无序链中满足如下运动方程。

$$[\epsilon - E(n)]a_n - a_{n+1} - a_{n-1} = 0 \quad N+1 \geq n \geq 1 \quad (4)$$

因此有：

$$\begin{pmatrix} a_{n+1} \\ a_n \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_n \\ a_{n-1} \end{pmatrix} \quad (5)$$

其中,

$$M = \begin{bmatrix} \varepsilon + E(n) & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

我们定义  $M$  为转移矩阵。

递推可得无序链两端的波函数的关系为,

$$\begin{pmatrix} a_{N+1} \\ a_N \end{pmatrix} = V_N \begin{pmatrix} a_1 \\ a_0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

其中,

$$V_N = \prod_{i=1}^{N+1} \begin{bmatrix} \varepsilon - E(i) & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

在上述系统其余部分, 即被无序链分开的两部分是完好的导体。这样我们可以考虑一个具有单位振幅粒子从无序链的左边完好部分入射进来, 假如反射和透射振幅分别为  $r_N$  和  $t_N$ , 则,

$$a_n = \begin{cases} \exp(ikn) + r_N \exp(-ikn) & n \leq 0 \\ t_N \exp(ikn) & n \geq N+1 \end{cases} \quad (7)$$

我们定义另一转移矩阵  $T_N$  如下,

$$T_N \begin{pmatrix} Y_N \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} T_{N11} & T_{N12} \\ T_{N21} & T_{N22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} Y_N \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ t_N \end{pmatrix} \quad (8)$$

则有,

$$|Y_N|^2 = |T_{N12}|^2 / |T_{N11}|^2 \quad (9)$$

$$|t_N|^2 = 1 / |T_{N11}|^2 \quad (10)$$

从方程 (6) - (8) 可得  $T_N$  为:

$$T_N = Q S^{-1} V_N S \quad (11)$$

其中,

$$Q = \begin{bmatrix} \exp(i k(N+1)) & 0 \\ 0 & \exp(-i k(N+1)) \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$S = \begin{bmatrix} \exp(-i k) & \exp(i k) \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

根据 Landauer 公式, 定义与能量相关的无量纲的电阻  $R(\varepsilon, N)$  为,

$$R(\varepsilon, N) = |Y_N|^2 / |t_N|^2 = |T_{N12}|^2 \quad (13)$$

为了更有效地对被函函数局域性判别, 我们定义

平均电阻如下，

$$\bar{R}(\xi, N) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N R(\xi, i) / i \quad (14)$$

对于非局域态，反射系数比单位模小，因此

$$\bar{R}(\xi, i) / i \equiv |r_i|^2 / i * (1 - |r_i|^2) \rightarrow 0, \text{ 当 } i \rightarrow \infty$$

和

$$P(\xi, N) \rightarrow 0, \text{ 当 } N \rightarrow \infty. \quad (15)$$

因此， $N$  达到一定值后，对于非局域态，当  $N$  增大，平均电阻单调地减小。反之则为局域态。

图 3 给出了平均电阻的对数相对于无序链体积的函数曲线。由图 3 可以看到，图 3(a) 表示为波函数的局域行为，然而图 3(b) 和图 3(c) 表示为波函数是非局域的。

## 五、总结

我们已经研究了一特别无序链的格点模型。能谱，波函数和特别定义的电阻可通过数值方法获得。我们得出如下结论，无序导致一些特别的峰在能谱中出现。当增加无序度，带宽增

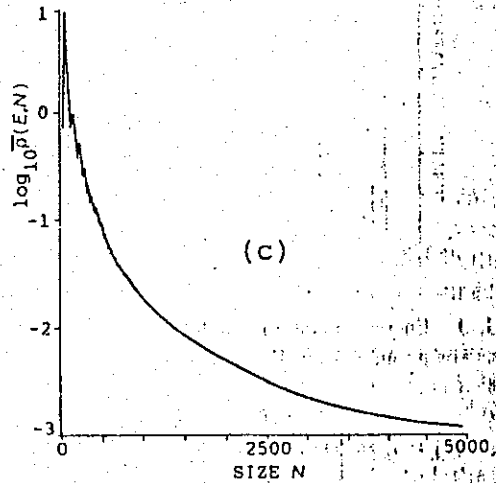
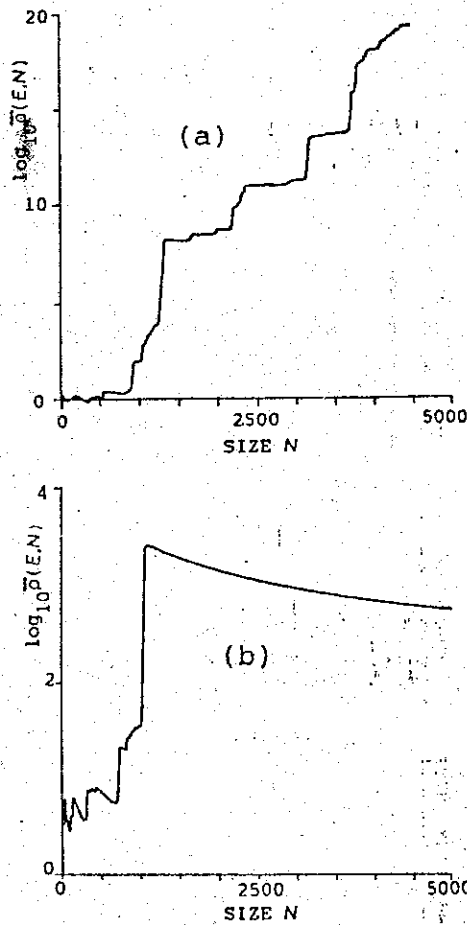


FIG. 3. Logarithm of average dimensionless resistivity as a function of the size of the system. The parameters of randomness are the same as those of Fig. 1(a). The corresponding wave function is (a) The wave function shown in Fig. 2(a). (b) The wave function with energy level  $E = -1.9845t$ . (c) The wave function shown in Fig. 2(b).

大。根据波函数和电阻计算的结果，当系统存在无序时，扩展态仍然存在，这一结论不同于 Anderson 局域化理论，但是与一些最近的文献的结论<sup>[10-12, 19]</sup>一致。这一结论已经被用来解释聚苯胺的绝缘体—金属转变<sup>[20]</sup>和高度掺杂的超聚乙炔的半导体—金属转变<sup>[21]</sup>。更进一步的工作中，我们考虑一种随机片模型，用平均方法给出非局域态存在及相应的能量位置<sup>[22]</sup>。

## 六、参考文献

- [1] Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, *Phys. Rev. B* 46, 12004 (1992).
- [2] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. J. Schellnhuber, and E. D. Siggia, *Phys. Rev. Lett.* 50, 1873 (1983).
- [3] M. Kohmoto and J. R. Banavar, *Phys. Rev. B* 34, 563 (1986).
- [4] Q. Niu and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* 57, 2057 (1986).
- [5] R. Riklund, *J. Phys. C* 19, L167 (1987).
- [6] Y. Y. Liu and R. Riklund, *Phys. Rev. B* 35, 6034 (1987).
- [7] Shijie Xiong, *J. Phys. C* 20, L167 (1987).
- [8] M. Kolar, *Phys. Rev. B* 39, 426 (1989).
- [9] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* 42, 673 (1979).
- [10] D. H. Dunlap, H. L. Wu, and P. W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* 65, 88 (1990).
- [11] D. H. Dunlap, K. Kundu, and P. W. Phillips, *Phys. Rev. B* 40, 10999 (1989).
- [12] J. C. Flores, *J. Phys. Condens. Matt.* 1, 8471 (1989).
- [13] A. Sasaki, M. Kasu, T. Yamamoto, and S. Noda, *Jpn. J. Appl. Phys.* 28, L1249 (1989).
- [14] P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* 44, 127 (1972).

- [15] K. S. Dy, S. Y. Wu, and C. Wongtawatngool, J. Phys. C12, L141 (1979).
- [16] K. S. Dy, S. Y. Wu, and T. Spratlin, Phys. Rev. B20, 4237 (1979).
- [17] J. B. Sokoloff, Phys. Rep. 126, 187 (1985).
- [18] P. Erdos and R. C. Herndon, Adv. Phys. 31, 65 (1982).
- [19] D. H. Dunlap and P. W. Phillips, J. Chem. Phys. 92, 6093 (1990).
- [20] H.-L. Wu and P. W. Phillips, Phys. Rev. Lett. 66, 1366 (1991).
- [21] F. C. Lavarda, D. S. Galvao and B. Laks, Phys. Rev. B45, 3107 (1992).
- [22] Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, submitted.

## 敬 谢

本文是在导师熊诗杰研究员的精心指导下完成的。先生严谨的学风，勤奋的态度使作者受益匪浅，特别是先生敏锐的物理直觉和清晰的物理图像，将对作者今后的学习和工作产生重要影响。

三年来，与众学友一起学习和讨论，共同度过了许多美好时光，令作者难忘。

学习期间，还得到许多先生、老师的关怀与帮助，特别是从李正中教授，王广厚教授，欧阳容百教授，董锦明副教授和柯善哲副教授处受益尤多。在课题研究过程中得到郑有焘教授的指教，在此一并向他们致以谢意。

最后，要感谢我的爱人俞梅同志给我提供大量的学习时间，生活上给我过多的照顾，精神上对我的鼓励。

## 作者参加的工作

1. Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, "Electronic properties of linear compositions of two binary compounds with random layer thicknesses", *Phys. Rev. B* 46, 12004 (1992).
2. Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, "Optical properties of GaAs/AlAs superlattices with randomly distributed layer thicknesses", *Phys. Rev. B* 47, March, 1993.
3. Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, "Electronic properties of one-dimensional two-band model with period-randomness", *J. Phys. Condens. Matter*, to be published.
4. Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, "Mixing of subbands in GaAs/AlAs superlattices with randomly distributed layer thicknesses", *Phys. Rev. B*, accepted.
5. Xiaoshuang Chen and Shijie Xiong, "Extended states in one-dimensional random-segment models", submitted.
6. Xiaoshuang Chen, Shijie Xiong and Guanghou Wang, "Transmission through a quantum wire with random layer thicknesses", submitted.