

温度和极化子效应对准二维强耦合激子基态的影响*

额尔敦朝鲁†

(河北科技师范学院数理系, 秦皇岛 066004)

(2007 年 3 月 6 日收到, 2007 年 4 月 13 日收到修改稿)

采用 Huybrechts 线性组合算符和 Lee-Low-Pines 变换法研究了温度和极化子效应对量子阱中激子与界面光学声子强耦合又与体纵光学声子弱耦合体系基态的影响, 推导出激子基态的诱生势和基态能量的移动的表达式. 以 AgCl/AgBr 量子阱为例进行了数值计算. 结果表明, 由激子-界面光学声子强耦合所产生的激子基态的诱生势和基态能量的移动随温度的升高而增大, 而由激子-体纵光学声子弱耦合所产生的激子基态的诱生势和基态能量的移动随温度的升高而减小.

关键词: 量子阱, 强耦合激子, 极化子效应, 温度依赖性

PACC: 6320K, 7138

1. 引 言

由于半导体量子阱和超晶格具有大的激子结合能、大的光学非线性和快的非线性响应速度, 它在有源和无源光电子器件中都具有广泛而诱人的应用前景^[1]. 因而, 近年来, 处于量子阱和超晶格等微结构中的激子问题备受人们的关注^[2-4]. 量子阱和超晶格是一种准二维(quasi-two-dimensional, Q2D)系统, 激子-声子耦合是该系统内的一个主要相互作用. 然而, 研究 Q2D 系统中激子-声子相互作用, 实际上是一个比较复杂的课题. 它涉及到载流子间的相互作用的屏蔽效应以及统计分布、量子限制势和实际 Q2D 结构的声子模式, 等等. Gu 等^[5,6]将极性膜中极化子的哈密顿量推广到激子情形, 导出了极性膜和量子阱中激子-声子体系的哈密顿量. Chun 等^[7]研究了界面光学(interface optical, IO)声子和体纵光学(longitudinal optical, LO)声子效应对量子阱中激子的影响. Zheng 等^[8]研究了无限方势阱中激子-光学声子系统的性质, 用变分法计算了激子的结合能以及激子与光学声子相互作用随阱宽的变化关系. Gerlach 等^[9]利用变分法研究了抛物阱中激子-LO 声子系统, 但尚未考虑界面纵光学声子. Zhao^[10]等利用变分法计算了极性三元混晶中 Wannier 激子

的结合能.

然而, 随着技术的进步, 在本领域仍有一些值得关注的课题急待研究. 比如, 1) 量子阱和超晶格中激子-声子强耦合体系的问题. 不难看出, 上述人们关于 Q2D 激子的工作大多都集中在激子-声子弱、中耦合情形. 弱耦合理论对 III-V 族化合物材料无疑是正确的. 但近年来, 随着分子束外延等高新技术的发展, II-VI 和 I-VII 族化合物材料被广泛注意. 实际上, II-VI 和 I-VII 族化合物半导体材料的带隙覆盖紫外到远红外区域, 且其材料中的激子结合能也比 III-V 族化合物半导体材料的大, 使此类材料的器件可能有效地在室温工作^[1]. 不过, 一般而言, II-VI 族化合物材料中的载流子-声子耦合常数比 III-V 族化合物材料中的载流子-声子耦合常数大一个数量级, 对于 I-VII 族的极性晶体, 其载流子-声子之间的耦合更强, 以至弱、中耦合理论不再适用. 2) Q2D 系统中激子的热学性质及其机理分析. 人们为了简单起见, 一般都只限于讨论零温(0 K)极限情形. 事实上, 研究有限温度下低维结构中元激发的性质, 对改善和提高器件的热学性能具有重要的实际意义. 国内外已报道了许多关于极化子的能量和质量的温度依赖性的研究工作. 有趣的是, 在这些理论研究中, 由于采用不同的电子-声子相互作用机理的假设和不同的理论近似, 提供了两种完全相反的结论.

* 河北科技师范学院博士基金(批准号 2006D001)资助的课题.

† E-mail: eerdunchaolu@sohu.com

Yokota^[11]最早考虑了极化子的质量与温度的关系,发现极化子的质量随温度的升高而减小;Fulton^[12]利用 Gurari 变分法导出了相反的结果.后来,有不少的理论工作^[13-15]也得到了与 Yokota 相同的结果,而另一些工作^[16-18]则得到了极化子的能量和质量随温度的升高而增加的结论.对不同的物质,实验结果也表明了相反的变化趋势^[19].另据报道, Lee 等^[20]研究发现,在半无限大碘化钾晶体中,由电子-LO 声子强耦合所产生的极化子的自陷能与电子-LO 声子弱耦合所产生极化子的自陷能随温度的变化趋势恰好相反.关于量子阱中的激子,最近, Guo 等^[21]采用变分法研究 ZnSe/ZnCdSe 量子阱中激子跃迁的温度依赖性时,也得到了激子基态结合能的温度依赖性,但尚未涉及声子效应.据目前所知,迄今为止,人们对量子阱和超晶格中激子-声子强耦合体系的温度依赖性的研究工作尚无报道.

本文采用 Huybrechts 在研究极化子时提出的线性组合算符和 Lee-Low-Pines (LLP) 么正变换法研究了温度和极化子效应对量子阱中激子与 IO 声子强耦合又与 LO 声子弱耦合体系基态的影响,导出了由极化子效应所产生的激子基态的诱生势和激子基态能量的移动的表达式,以 AgBr/AgCl 量子阱为例进行了数值计算,结果表明,不同支声子与激子相互作用所产生的激子基态的诱生势和基态能量的移动以及它们随电子与空穴间相对距离、量子阱宽度和温度的变化情况大不相同.

2. 线性组合与么正变换

考虑一个在 z 方向的厚度为 $2d$ 的量子阱:在 $|z| > d$ 的空间充满极性晶体 AgCl(垒材料),在 $|z| \leq d$ 空间被 AgBr(阱材料)占据着.在无限高方势阱模型下,激子-晶格系统的哈密顿量可以写成^[6]

$$H = \frac{P_{z_e}^2}{2m_e} + \frac{P_{z_h}^2}{2m_h} + \frac{P_R^2}{2M} + \frac{P_\rho^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon_\infty[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + \sum_{k,m,p} a_{k,m,p}^+ a_{k,m,p} \hbar\omega_{LO} + \sum_{q,p} b_{q,p}^+ b_{q,p} \hbar\omega_s + \sum_{k,m,p} \{B^* [W_{k,m,p}(z_e, z_h, \rho) a_{k,m,p}^+ \mathcal{E}^{-ik \cdot R} + \text{H.c.}] + \sum_{q,p} \left[\frac{\sinh(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-qd} \{C^* [V_{q,p}(z_e, z_h, \rho) b_{q,p}^+ \mathcal{E}^{-iq \cdot R} + \text{H.c.}]\} \quad (1)$$

式中各量的意义与文献[6]相同.

首先,我们效仿文献[14]和[15]中处理 Q2D 极化子的方法,对激子的质心坐标和动量引入 Huybrechts 线性组合算符^[22]

$$P_{Rj} = \left(\frac{M\hbar\lambda}{2} \right)^{1/2} (B_j + B_j^+), \\ R_j = i \left(\frac{\hbar}{2M\lambda} \right)^{1/2} (B_j - B_j^+), \quad (2)$$

其中, λ 为变分参数, $j = x, y$. 为了求有限温度下激子的基态能量,我们讨论变分函数 $U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2$ 在 $|\Phi\rangle$ 态中的期待值 \bar{H} 的极值问题,按变分原理,

$$\delta \bar{H} = \langle \Phi | U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 | \Phi \rangle = 0, \quad (3)$$

这里

$$U_1 = \exp \left[-i \left(\sum_{k,m,p} A_1 a_{k,m,p}^+ a_{k,m,p} + \sum_{q,p} A_2 b_{q,p}^+ b_{q,p} \right) \cdot \mathbf{R} \right], \quad (4)$$

$$U_2 = \exp \left[\sum_{k,m,p} (a_{k,m,p}^+ f_{k,m,p} - a_{k,m,p} f_{k,m,p}^*) + \sum_{q,p} (b_{q,p}^+ g_{q,p} - b_{q,p} g_{q,p}^*) \right] \quad (5)$$

是 LLP 么正变换^[23], 其中, $f_{k,m,p}$ ($f_{k,m,p}^*$) 和 $g_{q,p}$ ($g_{q,p}^*$) 为变分参数, A_1 和 A_2 是表征激子-声子耦合强度的物理量,对于我们所研究的激子与 IO 声子强耦合又与 LO 声子弱耦合体系, $A_1 = 1$ 和 $A_2 = 0$ ^[22,23].

$$|\Phi\rangle = |\phi(\rho, \xi)\rangle |\psi(z_e, z_h)\rangle |\{n_j\}\rangle \times |\{n_k\}\rangle |\{n_{q,p}\}\rangle \quad (6)$$

是有限温度下体系的尝试波函数,其中 $|\phi(\rho, \xi)\rangle$ 为二维激子内部运动的波函数, $|\psi(z_e, z_h)\rangle$ 为电子和空穴在 z 方向移动的本征函数, $|\{n_j\}\rangle$, $|\{n_k\}\rangle$ 和 $|\{n_{q,p}\}\rangle$ 分别描写激子的质心运动、LO 声子和 IO 声子态的波函数.如文献[19]所述,在有限温度时,声子频率随温度的上升而下降,但很不明显,可以近似地将电子(空穴)数和声子数以其平均数代替.按照量子统计

$$\bar{n} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\lambda}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}, \\ \bar{n}_k = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}, \\ \bar{n}_{q,p} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{s,p}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (7)$$

这里考虑了电子运动的对称性 $\bar{n} = \bar{n}_j$ ($j = x, y$), k_B 是玻耳兹曼常数, T 为热力学温度.

\bar{H} 对 $f_{k,m,p}$ ($f_{k,m,p}^*$), $g_{q,p}$ ($g_{q,p}^*$) 和 λ 的变分极值给出激子基态能量的上限

$$\begin{aligned} \bar{H} = & \Phi(\rho, \xi) | \Psi(z_e, z_h) | \\ & \times F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda) \\ & \times | \Psi(z_e, z_h) | \Phi(\rho, \xi), \quad (8) \end{aligned}$$

其中 $F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda)$ 为变分函数, 因它的推导过程十分繁杂, 因此不在此处列出, 下面只给出其计算结果.

$$\begin{aligned} & F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda) \\ = & \frac{P_{z_e}^2}{2m_e} + \frac{P_{z_h}^2}{2m_h} + \frac{P_\rho^2}{2\mu} - \frac{\xi e^2}{\epsilon_{\infty 1} \rho} + V_e(z_e) + V_h(z_h) \\ & + \left(\bar{n} + \frac{1}{2} \right) \hbar \lambda + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} \bar{n}_k (k^2 + u_l^2) \\ & + \sum_{q,p} n_{q,p} \hbar \omega_{s,p} + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} k^2 |f_{k,m,p}|^2 (4\bar{n}_k + 1) \\ & + \sum_{k,m,p} \hbar \omega_{l0} |f_{k,m,p}|^2 + \sum_{q,p} \hbar \omega_{s,p} |g_{q,p}|^2 \\ & + \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{k,m,p} (\nabla_{ez} f_{k,m,p}) \chi \nabla_{ez} f_{k,m,p}^* \right) \\ & + \frac{\hbar^2}{2m_h} \sum_{k,m,p} (\nabla_{hz} f_{k,m,p}) \chi \nabla_{hz} f_{k,m,p}^* \left. \right] (2\bar{n}_k + 1) \\ & + \left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{k,m,p} (\nabla_{ez} f_{k,m,p}) \chi \nabla_{ez} f_{k,m,p}^* \right) \\ & + \frac{\hbar^2}{2m_h} \sum_{k,m,p} (\nabla_{hz} f_{k,m,p}) \chi \nabla_{hz} f_{k,m,p}^* \left. \right] (2\bar{n}_k + 1) \\ & + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{k,m,p} (\nabla_\rho f_{k,m,p}) \chi \nabla_\rho f_{k,m,p}^* \chi (2\bar{n}_k + 1) \\ & + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{q,p} (\nabla_\rho g_{q,p}) \chi \nabla_\rho g_{q,p}^* \chi (2n_{q,p} + 1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \sum_{k,m,p} \{ B^* [W_{k,m,p}(z_e, z_h, \rho) f_{k,m,p}^*] + \text{H.c.} \} \\ & + \sum_{q,p} \left[\frac{\sin k(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-qd} \\ & \times \left\{ C^* [V_{q,p}(z_e, z_h, \rho) g_{q,p}^*] D(\bar{n}) e^{-\frac{\hbar q}{4M}} \right. \\ & \left. + \text{H.c.} \right\}, \quad (9) \end{aligned}$$

其中

$$D(\bar{n}) = 1 - \bar{n} \frac{\hbar q^2}{2M\lambda} + O\left(\frac{\hbar q^2}{2M\lambda}\right)^2, \quad (10)$$

变分参数 ξ 可由下式确定^[5]:

$$\begin{aligned} & \Phi(\rho, \xi) \Psi(z_e, z_h) | \\ & \times \frac{e^2}{\epsilon_{\infty 1}} \left[\frac{\xi}{\rho} - \frac{1}{[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{3/2}} \right] \\ & | \Psi(z_e, z_h) \Phi(\rho, \xi) = 0. \quad (11) \end{aligned}$$

$F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda)$ 对 $f_{k,m,p}$ ($f_{k,m,p}^*$), $g_{q,p}$ ($g_{q,p}^*$) 和 λ 的变分极值称为激子基态的有效哈密顿量 H_{eff} . 对于慢速运动的激子, 我们得到

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = & \min F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda) \\ = & H_{\text{eff}}^0 + H'_{\text{eff}}, \quad (12) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}^0 = & \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{kmp} \bar{n}_k (k^2 + u_l^2) + \sum_{qp} \bar{n}_{q,p} \hbar \omega_{s,p} \\ & + H_{1D} + H_{2D} \quad (13) \end{aligned}$$

是激子-声子系的未扰有效哈密顿量, 式中

$$H_{1D} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{z_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_{z_h}^2 + V_{\text{img}}(z_e) + V_{\text{img}}(z_h) + V_l^0(z_e) + V_l^0(z_h), & |z_e|, |z_h| \leq d, \\ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{z_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_{z_h}^2 + V_{\text{img}}(z_e) + V_{\text{img}}(z_h) + V_0 + V'_0, & |z_e|, |z_h| > d, \end{cases} \quad (14)$$

这里

$$\begin{aligned} V_l^0(z_e) = & -\frac{2M}{\hbar^2} |B|^2 \sum_k \left[\frac{\sum_{m=1,3,5,\dots}^{N/2} \cos^2\left(\frac{m\pi}{2d} z_e\right)}{k^2(4n_{k,m,r} + 1) + u_l^2} \left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2 \right]^2} \right. \\ & \left. + \sum_{m=2,4,6,\dots}^{N/2} \frac{\sin^2\left(\frac{m\pi}{2d} z_e\right)}{k^2(4n_{k,m,r} + 1) + u_l^2} \left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2 \right]^2} \right] \\ & + \left(\frac{2M}{\hbar}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m_e} |B|^2 \sum_k \left[\frac{\sum_{m=1,3,5,\dots}^{N/2} \sin^2\left(\frac{m\pi}{2d} z_e\right) \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2 (2n_{k,m,r} + 1)}{k^2(4n_{k,m,r} + 1) + u_l^2} \left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2 \right]^2} \right. \\ & \left. + \sum_{m=2,4,6,\dots}^{N/2} \frac{\cos^2\left(\frac{m\pi}{2d} z_e\right) \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2 (2n_{k,m,r} + 1)}{k^2(4n_{k,m,r} + 1) + u_l^2} \left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2 \right]^2} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{2M}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} |B|^2 \sum_k k^2 \left[\sum_{m=1,3,5,\dots}^{N/2} \frac{s_2^2 \cos^2 \left(\frac{m\pi}{2d} z_e \right) (2n_{k,m,+} + 1)}{k^2 (4n_{k,m,+} + 1) + u_l^2} \left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d} \right)^2 \right] \right. \\
& + \left. \sum_{m=2,4,6,\dots}^{N/2} \frac{s_2^2 \sin^2 \left(\frac{m\pi}{2d} z_e \right) (2n_{k,m,-} + 1)}{k^2 (4n_{k,m,-} + 1) + u_l^2} \left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d} \right)^2 \right]^2 \right] \\
& - \frac{2M}{\hbar^2} |C|^2 [D(\bar{n})] \sum_q \frac{\sinh(2qd)}{q} e^{-2qd} e^{-\frac{\hbar q^2}{2M}} \left[\frac{\cosh^2(qz_e)}{\epsilon_1(q) \cosh(qd) u_{s,+}^2} \right. \\
& + \left. \frac{\sinh^2(qz_e)}{\epsilon_2(q) \sinh(qd) u_{s,-}^2} \right] + \left(\frac{2M}{\hbar} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} |C|^2 [D(\bar{n})] \sum_q q \sinh(2qd) \\
& \times e^{-2qd} e^{-\frac{\hbar q^2}{2M}} \left[\frac{s_2^2 \cosh^2(qz_e) (2n_{q,+} + 1)}{\epsilon_1(q) \cosh(qd) u_{s,+}^4} + \frac{s_2^2 \sinh^2(qz_e) (2n_{q,-} + 1)}{\epsilon_2(q) \sinh(qd) u_{s,-}^4} \right] \quad (15)
\end{aligned}$$

是仅由电子坐标 z_e 所决定、描写电子与声子相互作用的有效势, 其中 $N = 2d/a$, a 为晶格常数. 如果将上式中的 z_e, m_e 和 s_2 分别用 z_h, m_h 和 s_1 代换, 立刻得到另一项仅由空穴 z_h 所决定的、描写空穴与

声子相互作用的有效势 $V_1^h(z_h)$. V_{img} 是像势^[6]. 正如文献[6]所述, 当 $V_0, V'_0 \rightarrow \infty$ 时, H_{1D} 可视为一维无限深方势阱中运动的电子-空穴两体的哈密顿量, H_{1D} 的本征值和本征函数可写成

$$E_{l_1 l_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2 l_1^2}{8m_e d^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 l_2^2}{8m_h d^2}, \quad (l_1, l_2 = 1, 2, 3, \dots), \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
|\psi_{l_1 l_2}^{\text{1D}}\rangle &= |\psi_{l_1}(z_e)\psi_{l_2}(z_h)\rangle \\
&= \begin{cases} \frac{1}{d} \sin\left[\frac{\pi l_1(z_e + d)}{2d}\right] \sin\left[\frac{\pi l_2(z_h + d)}{2d}\right], & |z_e|, |z_h| \leq d, \\ 0, & |z_e|, |z_h| > d, \end{cases} \quad (17)
\end{aligned}$$

$$H_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_\rho^2 - \frac{\xi e^2}{\epsilon_{\infty 1} \rho} \quad (18)$$

是描写激子在 x - y 平面内内部运动的能量, 在形式上与二维类氢原子系的哈密顿量相同, 因此, H_{2D} 的本征值和本征函数为^[5]

$$E_n^{2D} = -\frac{e^2 \xi^2}{2\epsilon_{\infty 1} a_0 (n + 1/2)^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

$$|\phi_{n,l}^{2D}\rangle = \left(\frac{e^{i\varphi}}{2\pi} \right)^{1/2} R_{n,l} [2(n + 1/2) a'_0], \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n, \quad (19)$$

其中, $\xi a'_0 = a_0 = \epsilon_{\infty 1} \hbar^2 / \mu e^2$. 至此, 我们可以写出未扰哈密顿量 H_{eff}^0 的本征值和本征函数分别为

$$\begin{aligned}
E_n &= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} \bar{n}_k (k^2 + u_l^2) + \sum_{q,p} \bar{n}_{q,p} \hbar \omega_{s,p} \\
&+ \frac{\pi^2 \hbar^2 l_1^2}{8m_e d^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 l_2^2}{8m_h d^2} \\
&- \frac{e^2 \xi^2}{2\epsilon_{\infty 1} a_0 (n + 1/2)^2}, \quad (20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|\Phi_0\rangle &= |\psi_{l_1 l_2}^{\text{1D}}(z_e, z_h) | \phi_{n,l}^{2D}(\rho, \xi) \rangle, \\
&(l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n, m = 0, 1, 2, \dots). \quad (21)
\end{aligned}$$

而(12)式右边第二项

$$H'_{\text{eff}} = V_1^i(z_e, z_h, \rho), \quad (22)$$

则不仅与电子和空穴坐标 z_e 和 z_h 有关, 而且还和电子与空穴相对距离 ρ 有关, 它是描写电子、空穴通过声子相互作用的有效势. 显然, H'_{eff} 可视为微扰哈密顿量, 它对激子基态能量的一级修正为

$$E'_0 = \langle \phi_{0,0}^{2D}(\rho, \xi) | V_1^i(\rho) | \phi_{0,0}^{2D}(\rho, \xi) \rangle \quad (23)$$

式中 $V_1^i(\rho)$ 是描写激子-声子相互作用的特征函数, 称为诱生势, 其具体表达式可写成

$$\begin{aligned}
V_1^i(\rho) &= \langle \psi_{11}^{\text{1D}}(z_e, z_h) | V_1^i(z_e, z_h, \rho) | \psi_{11}^{\text{1D}}(z_e, z_h) \rangle \\
&= V_{\text{ex-10}}^i(\rho) + V_{\text{ex-10}}^i(\rho), \quad (24)
\end{aligned}$$

其中

$$V_{\text{ex-LO}}^i(\rho) = \frac{256\alpha\hbar\omega_{\text{LO}}}{\pi^2 du_l} \sum_{m=1 \ 3 \ 5 \ \dots}^{N/2} \frac{1}{m^2(4-m^2)^2} \times \int_0^\infty \left\{ 1 + \frac{Ms_1 s_2(4\bar{n}_k+1)x}{\mu[\chi(4\bar{n}_k+1)+1]} \right\} \times \frac{J_0^k(x, \rho)}{[\chi(4\bar{n}_k+1)+1] \left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_l} \right)^2 \right]} dx \quad (25)$$

和

$$V_{\text{ex-IO}}^i(\rho) = 8\epsilon_{01}\epsilon_{\infty 1} du_l \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \int_0^\infty \left[\frac{\pi^2}{\chi(x^2 + \pi^2)} \right]^2 \times \left[1 + \frac{Ms_1 s_2(2\bar{n}_{q,+}+1)x^2}{\mu d^2 u_{s,+}^2} \right] \times \frac{\sinh^2(x) \tanh(x) J_0^k(x, \rho)}{\epsilon(x) d^2 u_{s,+}^2} \times e^{-2x} e^{-\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda}} \left[1 - \bar{n} \left(\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda} - 1 \right) \right] dx \quad (26)$$

分别表示由激子与 LO 声子弱耦合所产生的诱生势和激子与 IO 声子强耦合所产生的诱生势。由图 1—图 4 可以看出, $V_{\text{ex-LO}}^i(\rho)$, $V_{\text{ex-IO}}^i(\rho)$ 和 $V_0^i(\rho)$ 的取值总是大于零, 这说明, 由激子-声子相互作用在电子和空穴间产生的诱生势, 实际上都是屏蔽势。

激子-声子相互作用对激子基态能量的一级修正为

$$E_0' = \Delta E'_{\text{ex-LO}} + \Delta E'_{\text{ex-IO}}, \quad (27)$$

其中

$$\Delta E'_{\text{ex-LO}} = \frac{4096 \zeta_{1100}^2}{\pi^2 du_l} \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \sum_{1 \ 3 \ 5 \ \dots}^{N/2} \frac{1}{m^2(4-m^2)^2} \times \int_0^\infty \int_0^\infty \left[1 + \frac{Ms_1 s_2(4\bar{n}_k+1)x}{\mu[\chi(4\bar{n}_k+1)+1]} \right] \times \frac{y J_0^k(x, y)}{[\chi(4\bar{n}_k+1)+1] \left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_l} \right)^2 \right]} \times \exp(-4\xi_{1100}y) dx dy, \quad (28)$$

和

$$\Delta E'_{\text{ex-IO}} = 128\epsilon_{01}\epsilon_{\infty 1} du_l \xi_{1100}^2 \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \times \int_0^\infty \int_0^\infty dx dy \left[\frac{\pi^2}{\chi(x^2 + \pi^2)} \right]^2 \times \left[1 + \frac{Ms_1 s_2(2\bar{n}_{q,+}+1)x^2}{\mu d^2 u_{s,+}^2} \right] \times \frac{\sinh^2(x) \tanh(x) J_0^k(x, y)}{\epsilon(x) d^2 u_{s,+}^2}$$

$$\times \exp(-2x - 4\xi_{1100}y) \exp\left(-\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda}\right) \times \left[1 - \bar{n} \left(\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda} - 1 \right) \right] \quad (29)$$

分别表示由激子与 LO 声子弱耦合所产生的激子基态能量的移动和激子与 IO 声子强耦合所产生的激子基态能量的移动, $\alpha = (Me^2/\hbar^2 u_l) \chi(1/\epsilon_{\infty 1} - 1/\epsilon_{01})$, $\hbar^2 u_{s,+}^2/2M = \hbar\omega_{s,+}$, $\hbar^2 u_l^2/2M = \hbar\omega_{\text{LO}}$, $\epsilon(x) = [\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2} - (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2})e^{-2x}]^{1/2} [\epsilon_{01} + \epsilon_{02} - (\epsilon_{01} - \epsilon_{02}) \times e^{-2x}]^{1/2}$ 和 J_0^k 都是零阶的 Bessel 函数, 参数 ξ_{1100} 和 $\xi_{111\pm 1}$ 可利用“自恰法”从(11)式确定。

3. 结果与讨论

为了更清楚地讨论温度和极化子效应对量子阱中激子与 LO 声子弱耦合又与 IO 声子强耦合体系基态的影响, 我们选择了 AgBr 和 AgCl 作为量子阱内、外极性介质进行数值计算。所用材料的参数如表 1 所示, 数值结果分别示于图 1—图 6, 图中以 $\alpha\hbar\omega_{\text{LO}}$ 作为能量单位, 以晶格常数 a 作为长度单位。

表 1 材料的特征参数^[24, 25]

材料	ϵ_∞	ϵ_0	m_e/m_0	m_h/m_0	$\hbar\omega_{\text{LO}}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{\text{IO}}/\text{meV}$
AgBr	4.62	12.44	0.215	0.52	17.07	11.35
AgCl	3.97	9.5	0.302	-	23.02	14.88

注: m_e 是电子带质量, m_h 空穴质量, m_0 是裸电子质量

图 1 分别给出了 AgBr/AgCl 量子阱中激子与 LO 声子弱耦合所产生的诱生势 $V_{\text{ex-LO}}^i$ 和激子与 IO 声子强耦合所产生的诱生势 $V_{\text{ex-IO}}^i$ 在零温和不同阱宽下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化。由图 1(a) 可以看出, $V_{\text{ex-LO}}^i$ 的取值总是大于零。此外, $V_{\text{ex-LO}}^i$ 随 ρ 的减小而显著增大并随 N 的增加而增大, 这说明随着电子与空穴间相对距离的减小或阱宽的增加, LO 声子的屏蔽作用也增大, 这显然符合物理实际。由图 1(b) 可以看出, 与 $V_{\text{ex-LO}}^i$ 相类似, $V_{\text{ex-IO}}^i$ 的取值也总是大于零, 而且 $V_{\text{ex-IO}}^i$ 也随 ρ 的减小而增大, 但与 $V_{\text{ex-LO}}^i$ 不同的是, 当 ρ 较小时, $V_{\text{ex-IO}}^i$ 随 N 的减小而迅速增大, 同时, $V_{\text{ex-IO}}^i$ 随 ρ 的减小而增大的幅度也随 N 的减小而显著提高; 当 ρ 较大时, 尽管 $V_{\text{ex-IO}}^i$ 变为随 N 的增加而增大, 但量值很小, 而且随 ρ 的增加而迅速减小并趋于零。这表明, 在电子与空穴间相对距离较小或量子阱宽较小时, IO 声子的屏蔽作用较大。

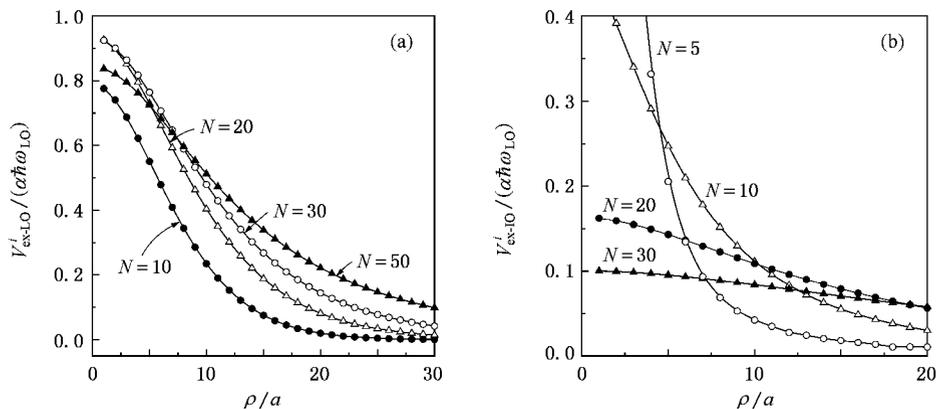


图 1 由激子与 (a) LO 声子弱耦合所产生的诱生势 V^i_{ex-LO} 和 (b) IO 声子强耦合所产生的诱生势 V^i_{ex-IO} 在零温和不同阱宽下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化

图 2 分别描绘了诱生势 V^i_{ex-LO} 和 V^i_{ex-IO} 在给定的阱宽 N 和不同的温度 T 下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化. 由图 2(a) 可以看出, V^i_{ex-LO} 随 ρ 的减小而迅速增大, 当 $\rho < 13.82$ 时, V^i_{ex-LO} 随 T 的升高而显著减小, 而且, 温度的升高明显削弱 V^i_{ex-LO} 随 ρ 的减小而增大的幅度. 这一结果表明, 激子-LO 声子弱

相互作用的机理是以激子先吸收再发射声子的过程为主, 换句话说, 随着温度的升高, 晶格的热振动增强, 激子-LO 声子相互作用减弱, 直至激子完全失去它的声子云而变为准自由激子. 此外, 由图 2(a) 还可以看出, 当 $\rho \geq 13.82$ 时, V^i_{ex-LO} 呈现出随 T 的升高而增大的趋势, 但很不明显.

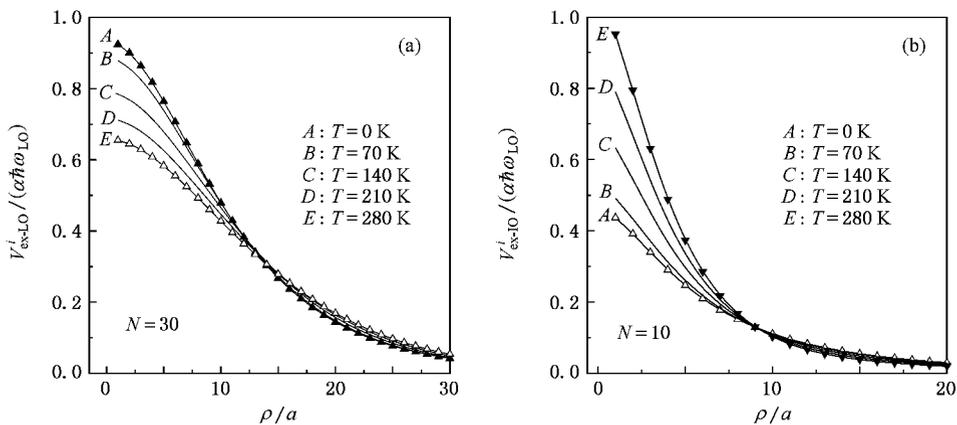


图 2 由激子与 (a) LO 声子弱耦合所产生的诱生势 V^i_{ex-LO} 和 (b) IO 声子强耦合所产生的诱生势 V^i_{ex-IO} 在给定的阱宽 N 和不同的温度 T 下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化

由图 2(b) 可以看出, V^i_{ex-IO} 随 ρ 的减小而迅速增大. 当 $\rho < 9.08$ 时, V^i_{ex-IO} 随 T 的升高而增大, 而且, 温度的升高也明显加强 V^i_{ex-IO} 随 ρ 的减小而增大的幅度. 这表明, 激子-IO 声子强耦合的机理是以激子发射再吸收声子的过程为主, 这是激子的一种自陷过程, 是激子-IO 声子强相互作用所导致的激子能谱的非抛物性的结果. 此外, 由图 2(b) 还可看出, 当 $\rho \geq 9.08$ 时, 尽管 V^i_{ex-IO} 呈现出随 T 的升高而减小的趋势, 但也很不明显.

图 3 表示了 AgBr/AgCl 量子阱中激子与 LO 声子弱耦合又与 IO 声子强耦合所产生的总诱生势 V^i_0 在零温和不同阱宽下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化. 由图 3 可以看出, V^i_0 的取值恒大于零, 这是由于 LO 声子和 IO 声子均对激子起屏蔽作用的结果. 另外, V^i_0 随 ρ 的减小而增大, 当 ρ 较小时, V^i_0 随 N 的减小而增大, 而且, V^i_0 随 ρ 的减小而增大的幅度随 N 的减小而增强; 当 ρ 较大时, V^i_0 变为随 N 的增大而显著增大, 而且, V^i_0 随 ρ 的增加而减小的

程度随 N 的增加而有所增加. 这些都说明, 当 ρ 较小时, LO 声子效应对 V_0^i 的贡献占主导地位, 当 ρ 较大时, LO 声子的屏蔽作用较大.

图 4 表示了 AgBr/AgCl 量子阱中激子与 LO 声子弱耦合又与 IO 声子强耦合所产生的总诱生势 V_0^i 在一定的阱宽 ($N = 30$) 和不同的温度 T 下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化. 比较图 4 和图 2(a) 可以看出, V_0^i 随 ρ 和 T 的变化规律与 V_{ex-LO}^i 基本相同. 但同时我们也发现, 当阱宽较小 (如 $N = 5, 10$) 时, V_0^i 随 ρ 和 T 的变化规律 (因篇幅有限没有给出图) 却与图 2(b) 所表示的 V_{ex-IO}^i 基本一致. 这反映了在阱宽较小时, IO 声子效应对诱生势的贡献占主导地位, 而在阱宽较大时, LO 声子效应对诱生势的贡献是主要的.

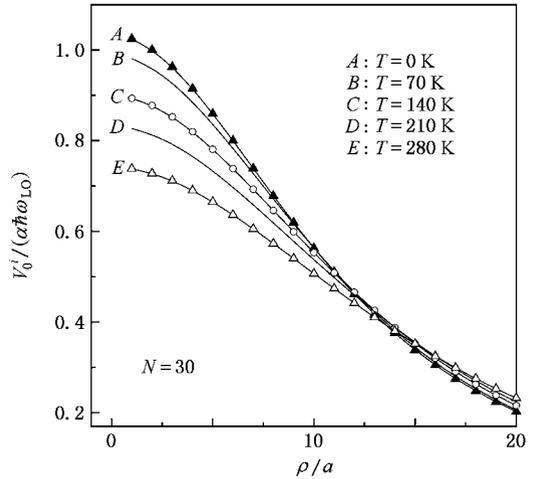


图 4 激子与 LO 声子弱耦合又与 IO 声子强耦合所产生的诱生势总 V_0^i 在一定的阱宽 ($N = 30$) 和不同的温度 T 下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化

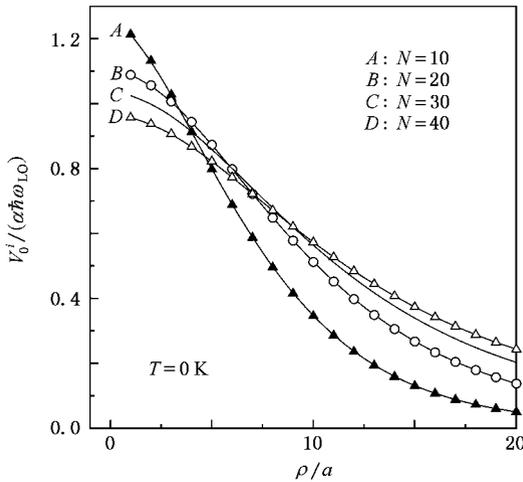


图 3 激子与 LO 声子弱耦合又与 IO 声子强耦合所产生的总诱生势 V_0^i 在零温和不同阱宽下随电子与空穴间相对距离 ρ 的变化

图 5 分别给出了 AgBr/AgCl 量子阱中由激子-LO 声子弱耦合所产生的激子基态能量的移动 $\Delta E'_{ex-LO}$ 和激子-IO 声子强耦合所产生的激子基态能量的移动 $\Delta E'_{ex-IO}$ 在不同温度 T 下随阱宽 N 的变化. 由图 5(a) 可以看出, 对于给定的 N , $\Delta E'_{ex-LO}$ 随 T 的升高而减小. 这一结果与文献 [20] 中得到的由电子-LO 声子弱耦合所产生的极化子自陷能的温度依赖性一致. 这表明激子-LO 声子弱相互作用的物理机理是以激子先吸收再发射声子的过程为主. 由图 5(a) 还可看出, 在 N 较小时, $\Delta E'_{ex-LO}$ 随 N 的增加而迅速增大并达到一个极大值, 然后再缓慢减小, 而且, $\Delta E'_{ex-LO}$ 取极值的 N 值随 T 的升高而变大. 由图 5(a) 可知, 当温度为 0 K, 100 K 和 200 K 时, $\Delta E'_{ex-LO}$ 取极大值的阱宽分别为 9.85, 11.48 和 15.07.

图 5 分别给出了 AgBr/AgCl 量子阱中由激子-LO

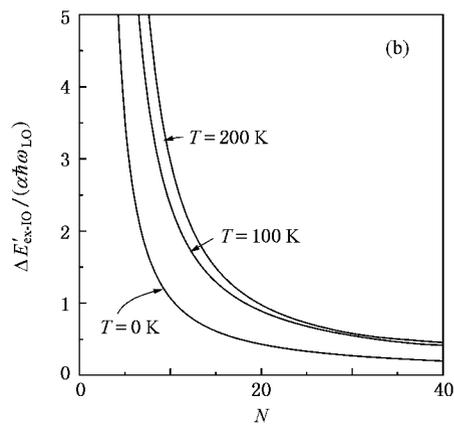
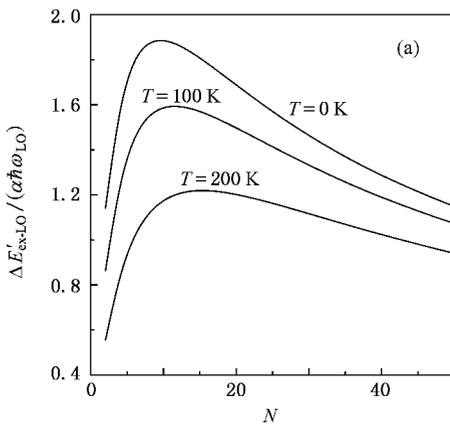


图 5 分别由 (a) LO 声子效应引起的激子基态能量的移动 $\Delta E'_{ex-LO}$ 和 (b) IO 声子效应引起的激子基态能量的移动 $\Delta E'_{ex-IO}$ 随阱宽 N 和温度 T 的变化

由图 5 (b) 可以看出, 对于给定的 N , $\Delta E'_{ex-IO}$ 随 T 的升高而增大. 显然, $\Delta E'_{ex-IO}$ 的温度依赖性与上述 $\Delta E'_{ex-LO}$ 的温度依赖性恰好相反, 但与文献 [20] 中所述的由电子-LO 声子强耦合所产生的极化子自陷能的温度依赖性一致, 这表明激子-IO 声子强相互作用的物理机理是以激子发射再吸收声子的过程为主. 由图还可以看出, 在阱宽较小 ($N < 30$) 时, $\Delta E'_{ex-IO}$ 随 N 的减小而单调快速增大, 而当 N 较大时, $\Delta E'_{ex-IO}$ 随 N 的增加而迅速减小, 这表明 IO 声子效应对窄阱中激子基态的影响较大.

图 6 描述了 AgBr/AgCl 量子阱中由 LO 声子效应和 IO 声子效应共同产生的激子基态能量的总移动 E'_0 随阱宽 N 和温度 T 的变化. 由图 6 可以看出, 在阱宽较小 ($N < 12$) 时, E'_0 随 T 的升高而增大, 随着 N 的增大, E'_0 随 T 的升高在某些 N 处开始出现突变, E'_0 由随 T 的升高而增大变为减小. 这表明

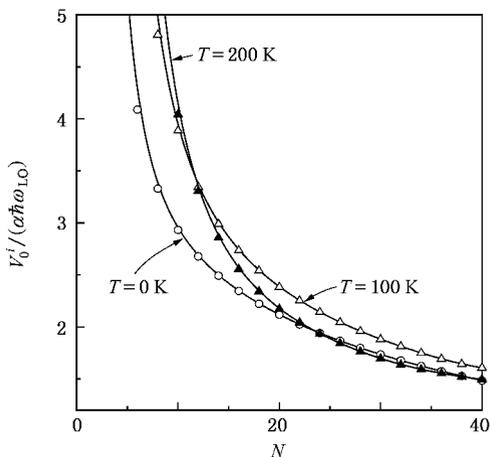


图 6 LO 声子效应和 IO 声子效应共同产生的激子基态能量的总移动 E'_0 随阱宽 N 和温度 T 的变化

在阱宽较小时, IO 声子效应对 E'_0 的贡献占主导地位, 而在阱宽较大时, LO 声子效应对 E'_0 的影响更大.

4. 结 论

采用线性组合算符和 LLP 变换法研究了温度和极化子效应对量子阱中激子与 IO 声子强耦合又与 LO 声子弱耦合体系基态的影响, 并推导出由极化子效应所产生的激子基态的诱生势和激子基态能量的移动的表达式, 结果表明:

1. 由极化子效应所产生的激子基态的诱生势 V_0^i 可写成两部分: $V_0^i = V_{ex-LO}^i + V_{ex-IO}^i$, 其中, V_{ex-LO}^i 来自激子-LO 声子弱耦合, 而 V_{ex-IO}^i 则来自激子-IO 声子强耦合. 诱生势总是大于零, 说明诱生势实际上都是屏蔽势; 由极化子效应所产生的激子基态能量的移动也可以写成两部分: $E'_0 = \Delta E'_{ex-LO} + \Delta E'_{ex-IO}$, 其中 $\Delta E'_{ex-LO}$ 来自激子-LO 声子弱耦合, 而 $\Delta E'_{ex-IO}$ 则来自激子-IO 声子强耦合.

2. V_{ex-LO}^i 和 V_{ex-IO}^i 都随 ρ 的增加而减小, V_{ex-LO}^i 随 T 的升高而减小, 而 V_{ex-IO}^i 随 T 的升高而增大, 而且 T 的变化显著影响 V_{ex-LO}^i 和 V_{ex-IO}^i 随 ρ 变化的幅度. V_{ex-IO}^i 随 N 的增加而单调快速减小, 而 $\Delta E'_{ex-LO}$ 随 N 的增加而迅速增大并达到最大值, 然后缓慢减小; ΔV_{ex-LO}^i 随 T 的升高而减小, 而 $\Delta E'_{ex-IO}$ 随 T 的升高而增大. 这些都表明激子-LO 声子弱耦合的物理机制与激子-IO 声子强耦合机理截然不同.

3. 在量子阱中极化子效应对激子基态的影响表现为, 在阱宽较小时, IO 声子效应的贡献占主导地位, 而在阱宽较大时, LO 声子效应的影响较大.

[1] Zhang X Q, Wang Y S, Xu Z, Hou Y B, Wang Z J, Xu S R, Tang Z K, Wang H Z, Li W L, Zhao F L, Cai Z G, Zhou J Y 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 180 [in Chinese] 张希清、王永生、徐征、侯延冰、王振家、徐叙、Tang Z K、汪河州、李伟良、赵福利、蔡志刚、周建英 1999 物理学报 **48** 180]

[2] Guo Z Z, Liang X X, Ban S L 2003 *Phys. Stat. Sol. (b)* **238** 173

[3] Zhang X Q, Mei Z X, Duan N, Xu Z, Wang Y S, Xu S R. 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1167 [in Chinese] 张希清、梅增霞、段宁、徐征、王永生、徐叙 2001 物理学报 **50** 1167]

[4] Zhang H, Liu L, Liu J J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 487 [in Chinese] [张红、刘磊、刘建军 2007 物理学报 **56** 487]

[5] Gu S W, Shen M Y 1986 *Phys. Rev. B* **35** 981792

[6] Yiang Q L, Mao J Q, Gu S W 1989 *J. Phys. : Condensed Matter* **1** 10343

[7] Chun D S, Won W L, Pei J H 1994 *Phys. Rev. B* **49** 14554

[8] Zheng R S, Matsuura M 1997 *Phys. Rev. B* **56** 2058

[9] Gerlach B, Usthoﬀ J, Smondyrev M A 1999 *Phys. Rev. B* **60** 16569

[10] Zhao G J, Liang X X, Ban S L 2004 *J. Optoelectronics · Laser* **15** 487

[11] Yokota T 1953 *Busseiron-kenkyu* **69** 137

[12] Fulton T 1956 *Phys. Rev.* **103** 1712

- [13] Li Y C , Gu S W 1990 *J. Phys. : Condensed Matter* **2** 1149
- [14] Eerdunchaolu , Xiao W , Xiao J L 2004 *Int. J. Mod. Phys. B* **18** 2003
- [15] Eerdunchaolu , Li S S , Xiao J L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4285 [in Chinese] 额尔敦朝鲁、李树深、肖景林 2005 物理学报 **54** 4285]
- [16] Peeters F M , Devreese J T 1985 *Phys. Rev. B* **31** 5500
- [17] Fedyanin V K , Rodriguez C 1982 *Phys. Stat. Sol. (b)* **110** 105
- [18] Qin R H , Gu S W 1997 *Solid State Commun.* **104** 425
- [19] Brummell M A , Nicholas R J , Hopkins M A , Harris J J , Foxon C T 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 77
- [20] Lee C M , Gu S W , Lam C C 1996 *Physica B* **229** 361
- [21] Guo Z Z , Liang X X , Ban S L 2005 *Optoelectronics Letters* **1** 0164
- [22] Huybrechts J 1976 *J. Phys. C : Solid State Phys.* **9** L211
- [23] Lee T D , Low F M , Pines D 1953 *Phys. Rev.* **90** 297
- [24] Albrich C , Bajaj K K 1997 *Solid State Commun.* **22** 157
- [25] Balderschi A , Czaja W , Tosatti E , Tosi M 1984 *The physics of latent image formation in silver halides* (Singapore : World Scientific)

Influences of temperature and polaron effect on the ground state of quasi-two-dimensional strong-coupling exciton *

Eerdunchaolu[†]

(Department of Mathematics and Physics , Hebei Normal University of Science & Technology , Qinhuangdao , Hebei 066004 , China)

(Received 6 March 2007 ; revised manuscript received 13 April 2007)

Abstract

The influences of temperature and polaron effect on the ground state of the system for which the exciton is strongly coupled with interface-optical (IO) phonons but weakly coupled with bulk-longitudinal-optical (LO) phonons in a quantum well , are studied by using the Huybrechts ' linear-combination operator and Lee-Low-Pines (LLP) transformation method . The expressions for the induced potential and energy shift of the ground state of the exciton were derived . Numerical calculations for AgCl/AgBr QW , as an example , are performed . The result indicates that the induced potential and the energy shift increases for strong exciton-IO-phonon coupling but decreases for weak exciton-LO-phonon coupling with temperature .

Keywords : quantum well , strong-coupling exciton , polaron effect , temperature dependence

PACC : 6320K , 7138

* Project supported by the Ph.D Foundation of Hebei Normal University of Science & Technology (Grant No. 2006D001).

[†] E-mail : eerdunchaolu@sohu.com