

# 量子环上的负电荷激子\*

吴 洪†

(集美大学物理系, 厦门 361021)

(2009 年 7 月 23 日收到, 2009 年 8 月 20 日收到修改稿)

讨论了负电荷激子  $X^-$  的能-光谱及其 Aharonov-Bhom 振荡. 负电荷激子是三个带电粒子组成的体系, 其基函数 (基矢) 数目大, 数值计算艰巨. 以往人们常把体系的空间波函数分离成质心运动和相对运动两部分来处理, 这种方法误差大, 只适用于外加磁场很小的情况. 直接由体系的 Hamilton 量出发, 基于角动量守恒, 把基矢按总角动量分类. 据此提出了一种简便的求解体系的本征矢和本征函数方案, 使用该方法使计算时间节省了 90% 以上. 所得计算结果没有抗磁现象, 且计算结果与现有的实验数据符合很好. 还讨论了环的半径、介质电容率和空穴的有效质量与 ABO 的关系.

关键词: 量子环, 负电荷激子, 能-光谱, Aharonov-Bhom 振荡

PACC: 7135, 7115P, 7320D

## 1. 引 言

激子的研究对绝缘体、半导体的物理性质和光电性质都具有重要的意义. 近年来激子的研究不论在理论或在实验上都非常活跃, 其中包括激子理论<sup>[1,2]</sup>、激子-激子间的相互作用<sup>[3,4]</sup>、外部磁场<sup>[5-7]</sup>和电场的影响<sup>[8]</sup>、介质电容率<sup>[9]</sup>以及空穴质量<sup>[10]</sup>对激子的 Aharonov-Bhom 振荡 (ABO) 的影响等等.

在数学处理上, 量子环上负电荷激子的研究中常把体系的空间波函数分离成质心运动和相对运动两部分<sup>[11,12]</sup>, 把相对运动的坐标原点放在空穴上, 且质心运动的总角动量取为零. 这样计算比较容易, 但在外磁场稍大时误差很大. 本文由  $H$  矩阵的运算规律出发, 在无外电场的情况下, 基于角动量守恒, 把基矢按总角动量分类. 据此提出了一种简便的求解体系的本征矢和本征函数方案. 计算结果与现有的实验数据符合很好.

## 2. 理 论

### 2.1. 模 型

在  $x-y$  平面上有一半径为  $R$ , 中心在原点的一

维量子环. 环上在球坐标  $R(R, \frac{\pi}{2}, \phi_1)$ ,  $R(R, \frac{\pi}{2}, \phi_2)$ ,  $R(R, \frac{\pi}{2}, \phi_0)$  处分别有一对空带上电子  $e_1, e_2$  和一个价带上空穴  $e_h$ , 空带和价带间的能隙为  $\epsilon_{\text{gap}}$ . 外磁场平行于  $z$  轴垂直地穿过环面, 其强度  $B = e_z B$ , 如图 1 所示. 若环上的一个电子与空穴复合, 辐射出一个光子, 后环上只留一个电子.

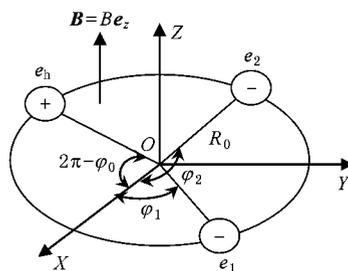


图 1 量子环上负电荷激子结构模型

### 2.2. Hamilton 量

体系的 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2m_h^*} \left( P_0 - \frac{e}{c} A_0 \right)^2 + \frac{1}{2m_e^*} \left( P_1 + \frac{e}{c} A_1 \right)^2$$

\* 福建省自然科学基金 (批准号 2006J0238, T0650010) 资助的课题.

† E-mail: hwu@jmu.edu.cn

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2m_e^*} (\mathbf{P}_2 + \frac{e}{c} \mathbf{A}_2)^2 \\
& + V_{e_1, e_2} (|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) + V_{e_1, h} (|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0|) \\
& + V_{e_2, h} (|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_0|) + H_{\text{Zeeman}} \\
= & (T_0 + T_1 + T_2) + V_{e_1, e_2} + V_{e_1, h} \\
& + V_{e_2, h} + H_{\text{Zeeman}} \\
= & T + V + H_{\text{Zeeman}}. \quad (1)
\end{aligned}$$

这里  $m_e^*$  和  $m_h^*$  分别为电子和空穴的有效质量,  $e$  为电子电荷的绝对值,  $\mathbf{A}$  为外加磁场的矢势. 由关系式  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  可知,

$$\mathbf{A} = A e_\phi = \left( \frac{1}{2} R_0 B \right) e_\phi,$$

其中  $e_\phi$  为环上场点切线方向的单位矢量,

$$e_\phi = -\sin\phi e_x + \cos\phi e_y.$$

$T_0, T_1$  和  $T_2$  分别为空穴和两个电子的动能项,  $V_{e_1, e_2}, V_{e_1, h}, V_{e_2, h}$  是三个荷电粒子间的库仑相互作用项,  $H_{\text{Zeeman}} = g\mu_B B S_z^{(X)}$  是 Zeeman 能量, 其中  $S_z^{(X)}$  是激子的总磁矩的  $Z$  分量. 本文略去这一项, 不会影响其定性结果.

### 2.3. 基矢与基矢集

为计算 Hamilton 矩阵元, 我们需先确定一组粒子的正交归一基函数(或基矢).

对于空穴,

$$\bar{\varphi}_{k_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 \phi_0)}, \quad (2a)$$

对于电子对,

$$\bar{\varphi}_{k_1, k_2} = \frac{1}{2\pi} e^{i(k_1 \phi_1 + k_2 \phi_2)}. \quad (2b)$$

它们构成三粒子态的基矢. 这里  $k_0, k_1, k_2$  为整数,  $-n \leq k_0, k_1, k_2 \leq +n$ , 引进  $n$  以限制基的数目.

两电子对是一对全同粒子, 考虑交换对称性时, 其轨道波函数应按电子对的总自旋  $S=0$  或  $S=1$  组成空间坐标的对称或反对称波函数<sup>[11-14]</sup>:

$$\varphi_{k_1, k_2}^{(S)} = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{1+\delta_{k_1, k_2}} \{ \bar{\varphi}_{k_1, k_2} + (-1)^S \bar{\varphi}_{k_2, k_1} \}. \quad (3)$$

其中

$$k_1 \leq k_2 \quad (S=0),$$

$$k_1 < k_2 \quad (S=1).$$

对三个粒子体系, 轨道空间波函数可写成

$$\varphi_{k_0, k_1, k_2}^{(S)} = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{1+\delta_{k_1, k_2}} \bar{\varphi}_{k_0} \{ \bar{\varphi}_{k_1, k_2} + (-1)^S \bar{\varphi}_{k_2, k_1} \}. \quad (4)$$

体系的总轨道角动量为  $K = \sum_{i=0}^n k_i$ , 当磁通给定时, 它是一个守恒量. 因而基矢可进一步表示为  $\varphi_{k_0, k_1, k_2}^{(S, K)}$ . 体系的任一本征函数均可用其展开为

$$\psi(S, K) = \sum_{k_0, k_1, k_2} C_{k_0, k_1, k_2}^{(S, K)} \varphi_{k_0, k_1, k_2}^{(S, K)}. \quad (5)$$

下面的计算中我们只讨论  $S=0$  的情况, 略去上标  $S$  和  $K$ .

### 2.4. 矩阵元

用基函数(4)式可算出(1)式中的 Hamilton 矩阵元.

动能项的矩阵元  $\langle T \rangle$  为

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_{k'_0, k'_1, k'_2} | T_0 + T_1 + T_2 | \varphi_{k_0, k_1, k_2} \rangle \\
= & \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2+\delta_{k'_1, k'_2} + \delta_{k_1, k_2}} 2\alpha \left[ \sigma \left( k_0 - \frac{N}{2} \right)^2 \right. \\
& \left. + \left( k_1 + \frac{N}{2} \right)^2 + \left( k_2 + \frac{N}{2} \right)^2 \right] \\
& \times \delta_{k'_0, k_0} [ \delta_{k'_1, k_1} \delta_{k'_2, k_2} \\
& + (-1)^{\delta_{k'_1, k_2}} \delta_{k'_2, k_1} ] \delta_{K', K}, \quad (6)
\end{aligned}$$

其中

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_e^* R^2},$$

$$\sigma = \frac{m_e^*}{m_h^*}.$$

$\sigma$  是电子和空穴的有效质量比.

$$N = \frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{\pi R^2 B}{\Phi_0}$$

是穿过环的磁通量子数,

$$\Phi_0 = \frac{hc}{2e}$$

是一个磁通量子所含的磁通, 其值为  $2.0678 \times 10^{-15} \text{ Wb}^{[15]}$ .

电子间的库仑作用项矩阵元  $\langle V_{e_1, e_2} \rangle$  为

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_{k'_0, k'_1, k'_2} | V_{e_1, e_2} | \varphi_{k_0, k_1, k_2} \rangle \\
= & \langle \varphi_{k'_0, k'_1, k'_2} | \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \varphi_{k_0, k_1, k_2} \rangle \\
= & \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2+\delta_{k'_1, k'_2} + \delta_{k_1, k_2}} \times \delta_{k'_0, k_0} \delta_{k'_1 + k'_2, k_1 + k_2} \delta_{K', K} \\
& \times \{ U |k'_2 - k_2| + U |k'_1 - k_1| \} \\
& + (-1)^{[ U |k'_2 - k_1| + U |k'_1 - k_2| ]}. \quad (7)
\end{aligned}$$

电子与空穴间的库仑作用项矩阵元  $V_{e_1, h}$  为

$$\begin{aligned} & \varphi_{k'_0, k'_1, k'_2} \left| V_{e_1, h} \right| \varphi_{k_0, k_1, k_2} \\ = & \varphi_{k'_0, k'_1, k'_2} \left| \frac{-e^2}{\epsilon \left| \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0 \right|} \right| \varphi_{k_0, k_1, k_2} \\ = & - \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{2+\delta_{k'_1, k'_2} + \delta_{k_1, k_2}} \\ & \times \delta_{k'_2, k_2} \delta_{k'_0 - k_0, k_1 - k_1} + \delta_{k'_1, k_1} \delta_{k'_0 - k_0, k_2 - k_2} \} \\ & \times U \left| k_0 - k_0 \right\} \delta_{K', K}. \end{aligned} \quad (8)$$

$V_{e_2, h}$  项与  $V_{e_1, h}$  项完全一样.(7)与(8)式中的数值积分  $U_j$  为<sup>[11-14]</sup>

$$U_j = \frac{2e}{\epsilon \pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\beta \frac{\cos(\beta)}{\sqrt{R_0^2 \sin^2 \beta + d^2}}, \quad (9)$$

其中  $d$  是考虑环的宽度影响并为了避免积分发散而引入的常数,这里我们取  $d = 0.05R$ .

在以下要考虑的情况中,对低激发态有贡献的主要是  $K$  在  $-3 \sim 0$  之间的态.当  $S = 0$  时,我们取  $n = 20$ .当  $K = -3, -2, -1, 0$  时,基矢的数目分别为 636, 639, 640 和 641.

### 2.5. 激子复合后的电子态及光子辐射能量

环上的空穴和一个电子复合后,辐射出一个光子,环上只剩一个电子,此电子波函数的基矢为

$$\varphi_k^{(e)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik\phi}. \quad (10)$$

$k$  值仍取  $-20 \sim +20$  之间的值.哈密顿及其矩阵元分别为

$$H^{(e)} = \frac{1}{2m_e^*} \left( \mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2, \quad (11)$$

$$\varphi_k \left| H^{(e)} \right| \varphi_k = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( k + \frac{N}{2} \right)^2. \quad (12)$$

同样用对角化方法可求出其本征能量  $\epsilon_e$  和本征函数为

$$\psi_e = \sum_{k=-20}^{20} G_k^{(e)} \varphi_k. \quad (13)$$

得出  $\epsilon_e$  后,可算出激子复合后辐射光子的能量为

$$\epsilon_p = h\nu = \epsilon_x - \epsilon_e + \epsilon_{gap}. \quad (14)$$

因禁带能隙  $\epsilon_{gap}$  是一个常数,在只考虑 ABO 效应时常把它略去<sup>[12]</sup>.

## 3. 物理参数和集合参数对能-光谱的影响

用上述方法来计算一些物理参数和几何参数对激子 ABO 的影响.

### 3.1. 环的半径对能-光谱的影响

基态的  $K$  为一好量子数.随着磁通的增加,  $K$  跳跃式下降,如图 2 所示(其中  $R = 10, 20, 50$  nm).这一定性结果不依赖于  $R$ .

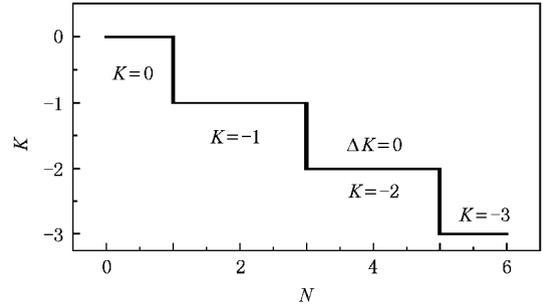


图 2 轨道总角动量  $K$  的 ABO 曲线

图 3 给出了在  $R = 10, 20$  和  $50$  nm 情况下激子基态能  $\epsilon_g$  随磁场变化的 ABO 曲线,激子复合后放出光子的能量  $\epsilon_p$  亦一起给出.由于我们着重讨论其 ABO,故略去禁带能隙  $\epsilon_{gap}$  这一常数<sup>[12]</sup>.由图 3 可知,ABO 只与磁场有关,它的周期为两个磁通量子.我们所得的结果与 Bayer 小组<sup>[12]</sup>的实验值完全一致.

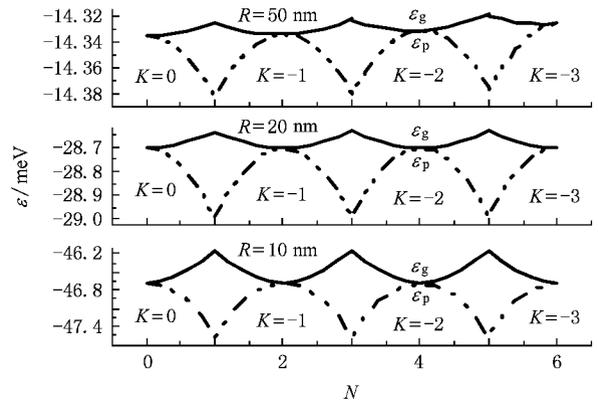


图 3 环半径  $R = 10, 20$  和  $50$  nm,  $\epsilon_r = 12.4$  时基态能量  $\epsilon_g$  和辐射光子能量  $\epsilon_p$  的 ABO 曲线

由图 3 可知  $\epsilon_g$  为负值,这显然源于两对 e-h 相互作用.当  $R$  减少时,这两对 e-h 相互作用的减少足以抵消动能的增加而有余,使得  $\epsilon_g$  更负.

ABO 曲线整体与磁场的增加关系不大,没有文献<sup>[11]</sup>所述的抗磁现象(即 ABO 曲线整体不随磁场的增大而上扬的现象).文献<sup>[11]</sup>中的抗磁结果是由于在他们的计算方法中没有考虑到对基态的轨道总

角动量  $K$  值应该随磁场而变的缘故.

### 3.2. 介质的电容率 $\epsilon_r$ 对 ABO 的影响

文献 9 就  $\epsilon_r$  对量子环上 ABO 的影响进行了研究. 不同半导体中的电容率  $\epsilon_r$  变化很大, 通常其值大于 2, 而对某些合金,  $\epsilon_r$  值可达  $10^2$  数量级. 对量子环,  $\epsilon_r$  的影响存在于库仑相互作用项中. 本文计算了  $\epsilon_r = 5, 12.4, 30$  和  $100$  时的 ABO 曲线, 其结果如图 4 所示. 由图 4 可见,  $\epsilon_r$  的改变不会改变 ABO 的周期, 而 ABO 的振幅则随  $\epsilon_r$  的增大而增大, 但整个  $\epsilon_g$  的绝对值随  $\epsilon_r$  的增加而减少. 这是因为  $\epsilon_r$  的增大导致带电粒子间相互作用减弱的缘故. 本文未涉及环的大小对电容率的影响<sup>[9]</sup>.

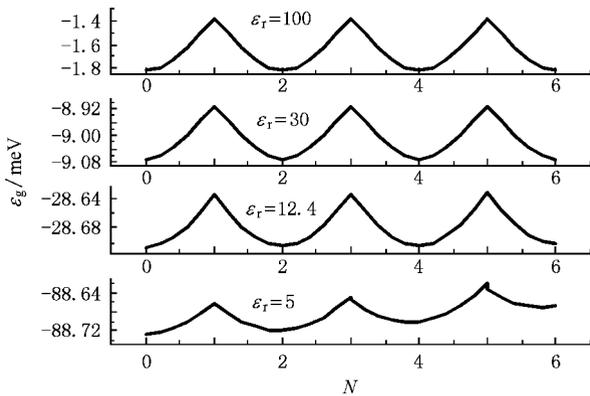


图 4 环半径为 20 nm,  $\epsilon_r = 5, 12.4, 30, 100$  时的 ABO 曲线

### 3.3. 空穴的有效质量 $m_h^*$ 对能谱的影响

在半导体上空穴的有效质量  $m_h^*$  变化比较大, Narvaez 等<sup>[10]</sup>研究了二维情况空穴的影响. 我们就 GaAs 中的轻空穴  $m_h^*/m_e^* = 1.22$  (文献 [10]) 和重空穴  $m_h^*/m_e^* = 6.7$  的情况进行了计算, 所得结果示于图 5. 我们看到空穴质量不影响 ABO 的周期, 但空穴质量的增大会降低空穴的动能, 从而使  $\epsilon_g$  有所下降. 同时, ABO 的振幅随  $m_h^*$  的增加而减小.

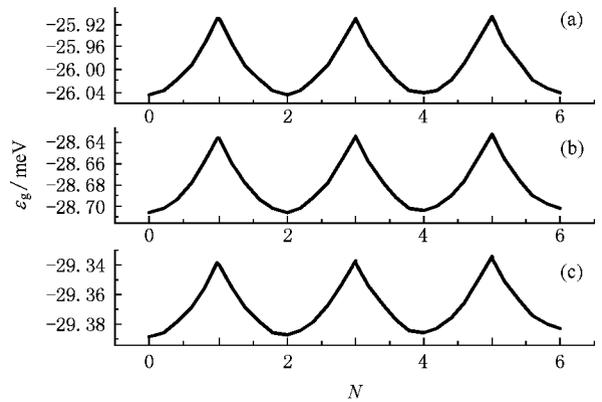


图 5 环半径为 20 nm,  $\epsilon_r = 12.4$  时的 ABO 曲线 (a)  $m_h^*/m_e^* = 1.22$  (b)  $m_h^*/m_e^* = 4$  (c)  $m_h^*/m_e^* = 6.7$

## 4. 结 论

有别于以往人们对处理激子计算时把空间波函数分离为质心运动和相对运动两部分, 本文所采用的是基于总角动量守恒的方法. 这是因为在无电场情况下, 体系对于  $z$  轴的转动不变性, 此特点由各哈密顿矩阵元中的  $\delta_{K,K'}$  因子所体现. 我们以磁通量子数  $N = 0-6$  为例, 对基态能量的 ABO 进行了计算, 同时考虑了环的半径  $R$ ,  $\epsilon_r$  及空穴质量对 ABO 的影响, 得到的主要结论如下: (1) 与只含电子的量子环一致, ABO 的周期只决定于磁通. (2) 我们计算光谱的结果与实验值<sup>[12]</sup>符合很好. (3) 我们的结果与文献 [11] 的计算结果不同, 在磁场大时未出现抗磁效应. 文献 [11] 使用的方法是把空间波函数分离成质心和相对运动两部分, 这种方法局限在  $K \equiv 0$  的情况, 而未考虑  $K$  随磁场的跳跃式变化. 我们还讨论了量子环上  $X^-$  的能谱与环半径、电容率及空穴质量的关系. 本文所得的结果加深了对这些因素的物理效应的理解.

衷心感谢中山大学物理系鲍诚光教授对本文工作的诚挚指导.

[1] Xiong W, Zhao H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1061 (in Chinese) [熊稳、赵 铎 2007 物理学报 **56** 1061]  
 [2] Xie W F 2006 *Chin. Phys.* **15** 203  
 [3] Patton P, Langben W, Woggon U 2003 *Phys. Rev. B* **68** 125316  
 [4] Klein D A 1983 *Phys. Rev. B* **28** 871  
 [5] Halonen V, Chakraborty T, Prettilainen P 1992 *Phys. Rev. B* **45** 5980

[6] Barticevic Z, Pacheco M, Duque C A, Oliveira L E 2003 *Phys. Rev. B* **68** 073312  
 [7] Xiao Z G 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 4509  
 [8] Baja K K, Liang X X, Wu Y F 2005 *Chin. Phys.* **14** 2314  
 [9] Hui P 2000 *Chin. Phys.* **9** 844  
 [10] Narvaez G A, Hawrylak P, Brum J A 2001 *Physica* **9** 716

- [ 11 ] Korkusinski M , Hawrylak P , Bayer M 2002 *Phys. Stat. Sol. B* **234** 273
- [ 12 ] Bayer M , Korkusinski M , Hawrylak P , Gutbrod T , Michel M , Forchel A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 186801
- [ 13 ] Wu H 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3026
- [ 14 ] Wu H , Bao C G 2006 *Chin. Phys.* **15** 2102
- [ 15 ] Mohr P , Taylor B N , Newell D B 2006 *Rev. Mod. Phys.* **80** 633

## Negatively charged exciton on the quantum ring<sup>\*</sup>

Wu Hong<sup>†</sup>

( Department of Physics , Jimei University , Xiamen 361021 , China )

( Received 23 July 2009 ; revised manuscript received 20 August 2009 )

### Abstract

In this paper , the energy-optical spectra and their Aharonov-Bohm oscillation of the negatively charged exciton are studied. A negatively charged exciton is composed of three charge particles , electrons and hole , the number of basic wave functions ( basic vectors ) which compose the state wave functions are large , so the numerical computing work is quite tedious. So far , many authors usually separate the spatial wave function into motion of mass centre and relative motion parts to save the numerical computing time. There is considerable discrepancy in the results of this method. It only suits the case when the external magnetic field is very weak. Considering the conservation of angular momentum , in case that there is no external electric field , we classify the whole set of basic vectors according to the values of their total orbital angular momentum. Then starting from Hamiltonian directly , we propose an alternative computing method to find the eigen values and eigen functions of the system. Our method can save more than 90% of computer time. There is no so called diamagnetic shift in our results. Our results fit well with the experimental data. The effects of the radii of the quantum ring , the value of dielectric constant and the effective mass of hole on the energy-optics spectra are systematically discussed.

**Keywords** : quantum ring , negatively charged exciton , energy-optics spectra , Aharonov-Bohm oscillation

**PACC** : 7135 , 7115P , 7320D

<sup>\*</sup> Project supported by the Natural Science Foundation of Fujian Province , China ( Grant Nos. 2006J0238 , T0650010 ).

<sup>†</sup> E-mail : hwu@jmu.edu.cn