

非对称方势阱中的激子及其与声子的相互作用*

邓艳平 吕彬彬 田 强[†]

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2009 年 10 月 27 日收到; 2009 年 11 月 30 日收到修改稿)

采用类 LLP (Lee-Low-Pines) 变换和分数维变分法, 在讨论有限深非对称方势阱 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 的分数维基础上, 计算了其中激子的基态能量以及声子对其影响, 随着势阱宽度增加, 激子能量先减小后增大, 出现一个最小值. 讨论了一侧势垒高度变化对分数维、激子基态能量的影响, 并发现声子作用使得激子能量明显增大. 另外, 非对称方势阱中的激子结合能随阱宽的减小而增大, 而且随一侧势垒的增大而增大.

关键词: 非对称方势阱, 激子, 声子, 基态能量

PACC: 7135, 7138

1. 引 言

通常人们研究的量子阱是对称的^[1-6], 即势阱两侧的势垒高度是相同的. 对称量子阱中的电子、电子-声子的相互作用^[7-9] 以及激子、激子-声子^[10-13] 的研究取得了很多重要的成果. 人们用连续介质模型、LLP (Lee-Low-Pines) 变换研究了对称方势阱中的电子-声子相互作用^[14-16], 得到了电子-声子的基态能量等特性; 采用变分法计算了对称方势阱中的激子结合能^[17-26]. 在变分法的基础上, He^[27] 用分数维模型研究了各向异性体材料中的万尼尔激子性质, 随后, 分数维方法被广泛应用于讨论低维系统的激子态, 得到了令人满意的结果^[28, 29], 近年来还被用于研究极化子问题^[30, 31].

在对称量子阱中, 系统的很多参量, 例如粒子的约化质量、运动的受限长度、分布概率具有相应的对称性, 研究过程和结果相对简单. 在实际的器件应用中, 往往面临非对称量子阱的问题^[16, 32, 33]. 本文在对称方势阱的基础上, 采用类 LLP 变换和分数维变分法, 把激子能量的变分函数推广应用于非对称方势阱, 通过计算激子受限长度, 研究 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 非对称方势阱中的激子能量以及声子对其影响, 并分析了激子结合能随势阱不对称程度、阱宽之间的变化关系.

2. 非对称方势阱中激子与声子的相互作用

考虑厚度为 L 的 GaAs 被夹在 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 与 $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 之间, 构成三明治结构的 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 量子阱; $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 的禁带宽度随 Al 的成分 x 增大而增大, 这是一个有限深非对称方势阱. 势阱中激子与声子相互作用的哈密顿量为

$$H = H_{\text{ex}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{ex-ph}}, \quad (1)$$

其中第一项是激子的哈密顿算符, 在各向同性有效质量近似下为

$$H_{\text{ex}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_{\text{well}}, \quad (2)$$

这里势阱函数为

$$V_{\text{well}} = V_e(z_e) + V_h(z_h), \quad (3)$$

其中 z 垂直于材料层的方向, 上式中电子和空穴的势阱函数为

$$V_j(x, z_j) = \begin{cases} V_{1,j}(x) & (z_j < 0), \\ V_w & (0 \leq z_j \leq L), \\ V_{r,j} & (z_j > L), \end{cases} \quad (4)$$

其中 $j = e, h$ 分别代表电子和空穴, 下标 l, w, r 分别代表左势垒、势阱、右势垒区域. 对于量子阱 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$, 左势垒为

* 国家自然科学基金 (批准号: 10574011) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: qtian@bnu.edu.cn

$$V_{1,j}(x) = \begin{cases} 0.6 \times 1250x & (j = e), \\ 0.4 \times 1250x & (j = h). \end{cases} \quad (5)$$

(1)式中的第二项是自由声子哈密顿算符,为简单起见,只考虑纵向光学(LO)声子

$$H_{ph} = \sum_q \hbar \omega a_q^\dagger a_q, \quad (6)$$

(1)式中的最后一项是激子-声子相互作用哈密顿,可以写为^[28]

$$H_{ex-ph} = \sum_q [V_q a_q e^{iq \cdot r} (e^{i\beta_2 q \cdot r} - e^{-i\beta_1 q \cdot r}) + h.c.], \quad (7)$$

其中 $\beta_1 = m_e/M, \beta_2 = m_h/M, M = m_e + m_h, V_q = i \left[\frac{2\pi e^2}{V} \frac{\hbar \omega}{q^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2}$.

3. 类 LLP 变换和变分法解

类 LLP 变换包括两个么正变换. 通过第一个么正变换可以去掉(1)式哈密顿中激子的质心坐标, 第二个么正变换是位移振子变换, 两个么正变换算符分别是

$$U_1 = \exp[i(\mathbf{K} - \sum_q \mathbf{q} a_q^\dagger a_q) \cdot \mathbf{R}], \quad (8)$$

$$U_2 = \exp\left(\sum_q (f_q^* a_q - f_q a_q^\dagger)\right), \quad (9)$$

其中 $\hbar \mathbf{K}, \mathbf{R}$ 分别是激子的总动量和质心坐标. 位移振幅 f_q^*, f_q 可以利用能量极小条件计算出来^[30]. 经过类 LLP 变换, 激子-声子系统的哈密顿算符为

$$\begin{aligned} H' &= U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 \\ &= H_{ex} + \sum_q (\hbar \omega + \hbar^2 q^2 / 2M) (a_q^\dagger + f_q^*) (a_q + f_q) \\ &\quad + \sum_q [V_q (a_q + f_q) (e^{i\beta_2 q \cdot r} - e^{-i\beta_1 q \cdot r}) + h.c.]. \end{aligned} \quad (10)$$

下面采用分数维变分法计算激子系统的基态能量. 激子-声子基态波函数为

$$|\psi\rangle = |\phi(\mathbf{r})\rangle |0\rangle, \quad (11)$$

其中 $|0\rangle$ 是零声子态, $|\phi(\mathbf{r})\rangle$ 是激子基态的变分波函数, 可表示为

$$\begin{aligned} \phi(r) &= \left[\frac{2^{2\beta}}{(\beta-1)^\beta \Gamma(\beta) \lambda^\beta} \right]^{1/2} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{2}{\beta-1} \frac{r}{\lambda}\right), \end{aligned} \quad (12)$$

式中 λ 为变分参量, $\Gamma(\beta)$ 为 Γ 函数, β 是非对称量子阱的分数维

$$\beta = 3 - \exp(-L_w / 2a_b^*), \quad (13)$$

其中 L_w 是与阱宽 L 和势垒高度有关的激子运动的

受限长度, a_b^* 是有效玻尔半径. 在此我们将对称势阱中的受限长度^[34]推广到非对称方势阱, 有

$$L_w = \frac{1}{k_l} + L + \frac{1}{k_r}, \quad (14)$$

其中 $\frac{1}{k_l} = \frac{1}{k_{le}} + \frac{1}{k_{lh}}, \frac{1}{k_r} = \frac{1}{k_{re}} + \frac{1}{k_{rh}}$ 分别是在左右两边势垒中激子的波数,

$$k_{\alpha j} = \frac{\sqrt{2m_{\alpha j}(V_{\alpha j} - E_j)}}{\hbar}, \quad (15)$$

式中, $\alpha = l, r$ 代表左右势垒, E_j 为势阱中的电子($j = e$)和空穴($j = h$)能量. 上式中的 $m_{\alpha j}$ 是粒子在 z 方向的有效质量, 左势垒中 $m_{lj}(x)$ 随 Al 成分 x 的变化关系为

$$m_{lj}(x) = \begin{cases} 0.067 + 0.835x & (j = e), \\ 0.094 + 0.056x & (j = h). \end{cases} \quad (16)$$

我们知道, 在三维系统中, 不考虑声子影响的激子基态的变分能量为

$$E_0^{(3)} = \langle \phi^{(3)}(r) | -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} | \phi^{(3)}(r) \rangle. \quad (17)$$

将上式推广到分数维模型. 把(12)式代入(17)式, 计算得到维数为 β 的空间中激子的基态能量为

$$\begin{aligned} E_0^{(\beta)}(\lambda) &= \langle \phi(r) | -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} | \phi(r) \rangle \\ &= \frac{2^{2\beta-3}}{(\beta-1)^{\beta-1} \Gamma(\beta)} \frac{1}{\lambda^{\beta-1}} \\ &\quad - \frac{2^{2\beta-3}}{(\beta-1)^{\beta-2} \Gamma(\beta)} \frac{1}{\lambda^{\beta-2}}, \end{aligned} \quad (18)$$

其中 $\mu = m_e m_h / M$ 是激子的约化质量. 当 $\lambda = \frac{1}{\beta-2} =$

$\frac{1}{1 - \exp(-L_w / 2a_b^*)}$ 时, 上式值最小, 得到不考虑声子影响的激子基态能量. 在不受限的三维空间中, 即 $L \rightarrow \infty$ 时, $L_w \rightarrow \infty$, 维数 $\beta = 3$, (18) 式为 $E_0^{(3)}(\lambda) = \frac{1}{\lambda^2} - \frac{2}{\lambda}$, 此式与 Wang 等^[35]的结果相一致.

考虑 LO 声子的影响, 由变换后的哈密顿算符(10)式和分数维变分波函数(12)式, 得到非对称方势阱中激子-声子系统能量的变分形式

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \langle \phi(r) | H' | \phi(r) \rangle \\ &= \frac{2^{2\beta-3}}{(\beta-1)^{\beta-1} \Gamma(\beta)} \frac{1}{\lambda^{\beta-1}} \\ &\quad - \frac{2^{2\beta-3}}{(\beta-1)^{\beta-2} \Gamma(\beta)} \frac{1}{\lambda^{\beta-2}} \\ &\quad - \sum_q \frac{|V(q)|^2 |V_q|^2}{\hbar^2 (u^2 + q^2) / 2M}, \end{aligned} \quad (19)$$

其中 $V(q) = \langle \phi(r) | e^{i\beta_2 q \cdot r} - e^{-i\beta_1 q \cdot r} | \phi(r) \rangle, u^2 = (2M\omega/\hbar)^{1/2}$.

(19)式中的前两项是激子能量,与声子无关,只与势阱形状有关,后一项描述了激子与声子之间的相互作用.

对(19)式进行变分,得到激子-声子系统的基态能量为

$$E_g = \min_{\lambda} E(\lambda). \quad (20)$$

这样,在考虑声子影响之后的激子结合能为

$$E_b = E_{\text{free}} - E_g. \quad (21)$$

上式中的 E_{free} 是自由电子-声子和空穴-声子的能量之和.

4. 数值结果和讨论

4.1. 非对称量子阱的分数维

量子阱的空间维数是分数的. 三明治结构的阱宽 $L \rightarrow 0$ 且无限深的量子阱,维数 $\beta \rightarrow 2$; 阱宽 L 较大且势垒不高的量子阱,维数 $\beta \rightarrow 3$; 一般情况下,量子阱的维数是介于 2 与 3 之间的分数维. 图 1 是由(13)式数值计算得到的非对称量子阱 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 中,激子运动空间的分数维在不同的左势垒高度(和 Al 的成分 x 有关)情况下随阱宽 L 的变化关系.

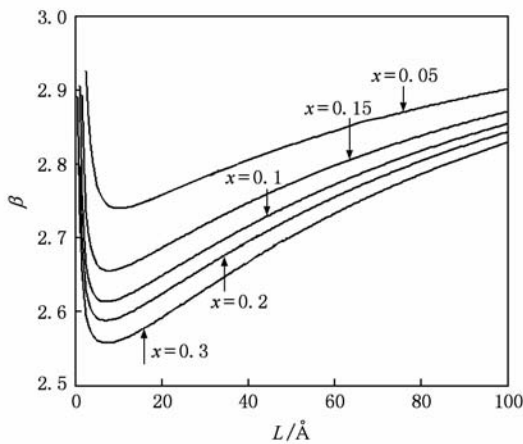


图 1 非对称量子阱的分数维

在有限深的 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 势阱中,量子阱宽 L 较大时,随着阱宽的增大,量子阱对激子的束缚作用减小,激子运动空间的分数维随之增大,且 $\beta \rightarrow 3$. 随着阱宽 L 的减小,分数维 β 存在极小值; L 进一步减小, β 反而增大,这是由于很窄的

有限深势阱不能有效地束缚激子,激子波函数会显著地分布于有限高的势垒之中,且随着 $L \rightarrow 0$,有 $\beta \rightarrow 3$. 这与无限深方势阱情况不同:在无限深势阱中,由于势阱对波函数的限制作用,分数维 β 随阱宽 L 的减小而单调减小^[30],且 $\beta \rightarrow 2$.

$x = 0.3$ 是左右势垒等高的对称量子阱情况. 随着 x 减小,左势垒降低. 图 1 给出了不同 x 情况下的非对称量子阱的分数维随阱宽的变化关系. 对于相同的阱宽 L ,随着 x 减小,分数维 β 单调增大,这是左势垒随 x 减小而降低,对激子的空间限制作用减弱的结果.

4.2. 激子基态能量

在不同的左势垒高度下,非对称量子阱 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 中的激子基态能量与势阱宽度的关系如图 2 所示. 从图 2 可以看出,无论是否考虑声子影响,激子基态能量的变化趋势都是一样

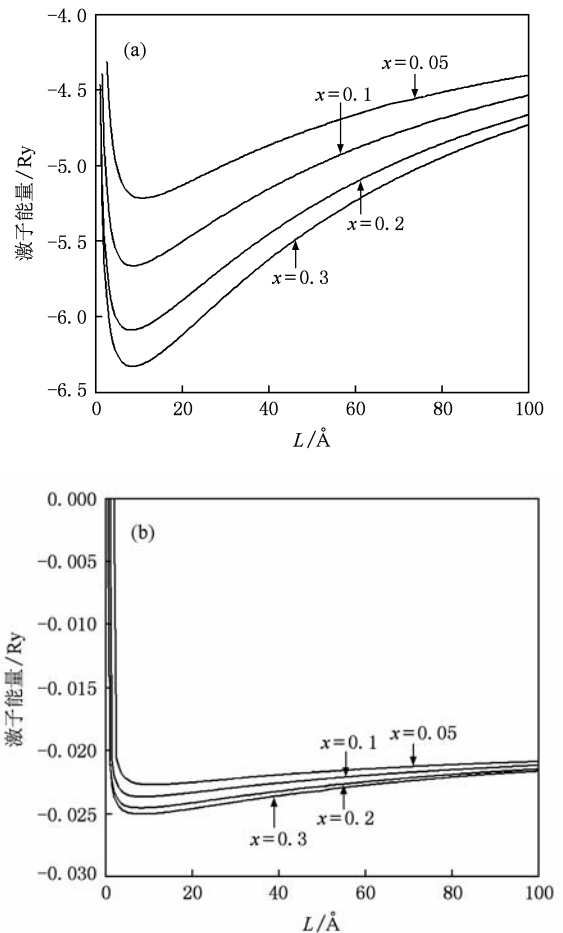


图 2 非对称量子阱中的激子基态能量(1 Ry = 13.606 eV)

(a) 不考虑声子影响, (b) 考虑声子影响

的:随势阱宽度增加,激子能量先减小后增大,出现一个最小值.这是因为阱宽较大时,量子阱限制对激子能量起主要作用,随阱宽的减小,激子感受到的限制作用逐渐增强,引起其基态能量降低;当阱宽减小到与激子大小相比拟后,波函数的隧穿效应开始显现,随阱宽的进一步减小,激子感受到的限制作用反而减小,激子波函数显著地分布于有限高的势垒之中,其基态能量增大.图2中的结果还表明:左势垒中Al的成分 x 减小,势阱两边的势垒高度相差增大,激子的基态能量相应增大,当左右两边势垒高度相等时,激子能量最小,这也是左势垒降低引起限制作用减弱的结果.

激子能量出现最小值,与空间维数有最小值相对应,在 $L \rightarrow 0$ 以及 L 较大时,分数维 $\beta \rightarrow 3$,量子阱中的激子逐渐趋近于体激子,这是大家熟知的二维激子的基态能量低于三维激子的一个分数维反映.

声子效应对激子基态能量的影响很大,在考虑声子影响之后,图2(b)中激子基态能量显著增大,且这个能量在不同左势垒高度下的大小差异明显减小.图3所示是由声子引起的激子基态能量的变化值与阱宽之间的关系.随阱宽的减小,激子能量变化先增大后减小,出现一个最大值,这与Oshiro等^[36]的结论相一致.激子能量变化的这个特点与图1中分数维的变化相对应,维数越低,声子影响越大.另外,激子能量的变化随着左势垒的增大(x 增大)而增大.

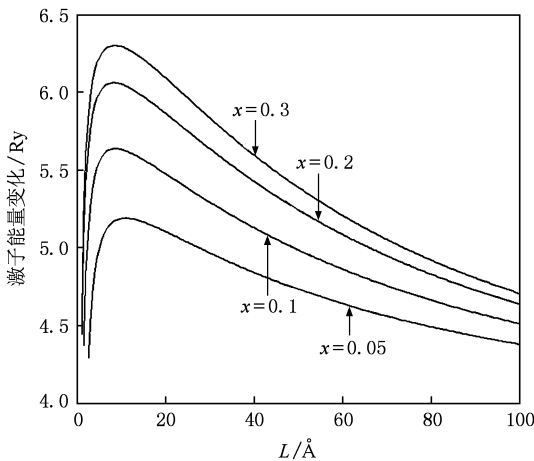


图3 非对称量子阱中声子引起的激子能量变化

4.3. 激子结合能

下面计算和分析非对称方势阱中,考虑声子影响下的激子结合能与量子阱宽之间的关系,结果如图4所示.由图4可见,随着阱宽 L 的增大,激子结合能单调减小.对于相同的阱宽 L ,随着 x 的增大,即左边的势垒高度增大,量子阱的分数维减小,激子结合能增大.

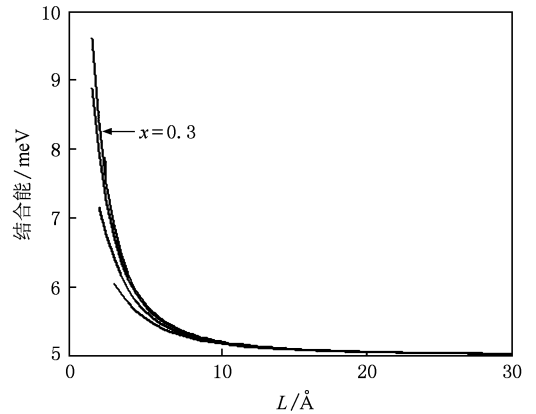


图4 非对称量子阱中的激子结合能 曲线从上至下, x 数值分别为0.3,0.2,0.1,0.05

5. 结 论

本文采用类LLP变换和分数维变分法,研究了 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 非对称方势阱中的激子及其声子对其影响.首先得到量子阱的空间维数是分数的,介于2与3之间;有限深的量子阱中,当阱宽很大或者很小时,量子阱的空间维数均趋于3,在这两种情况之间存在一个分数维的极小值;对于非对称方势阱,随着一侧势垒的降低,分数维增大.计算得到的量子阱 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ 中的激子基态能量及声子对其影响如下:随着势阱宽度增加,激子能量先减小后增大,出现一个最小值;当阱宽固定时,激子能量随着一侧势垒高度的减小而增大.分析显示声子影响使激子的能量显著增大,且这个变化随阱宽的减小出现一个最大值.非对称方势阱中的激子结合能随阱宽的减小而单调增大;对于相同的阱宽,随一侧势垒的增大,其随着分数维的减小而相应增大.

- [1] 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]
- [2] Miller R C, Gossard A C, Kleinman D A, Munteanu O 1984 *Phys. Rev. B* **29** 3470
- [3] Sen S, Capasso F, Gossard A C, Spah R A, Hutchinson A L, Chu S N G 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 1428
- [4] Chou S Y, Harris J S 1988 *Appl. Phys. Lett.* **52** 1422
- [5] Yuh P, Wang K L 1988 *Phys. Rev. B* **38** 13370
- [6] Kopf R F, Herman M H, Schnoes M L, Perley A P, Livescu G, Ohring M 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 5004
- [7] Liu C H, Chen C Y, Ma B K 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2022 (in Chinese) [刘翠红、陈传誉、马本堃 2002 物理学报 **51** 2022]
- [8] Zhao F Q, Zhou B Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4856 (in Chinese) [赵凤岐、周炳卿 2007 物理学报 **56** 4856]
- [9] Yu Y F, Xiao J L, Yin J W, Wang Z W 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2236
- [10] Sakiroglu S, Dogan U, Yildiz A, Akgungor K, Epik H, Ergun Y, Sari H, Sokmen I 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1578
- [11] Harouni M B, Roknizadeh R, Naderi M H 2009 *Phys. Rev. B* **79** 165304
- [12] Mikhailov I D, Garcia L F, Marin J H 2008 *Microelectron. J.* **39** 378
- [13] Senger R T, Bajaj K K 2003 *Phys. Rev. B* **68** 045313
- [14] Wendler L, Haupt R 1987 *Phys. Stat. Sol. (b)* **143** 487
- [15] Mori N, Ando T 1989 *Phys. Rev. B* **40** 6275
- [16] Liang X X 1992 *J. Phys. : Condens. Matter* **4** 9769
- [17] Zhao F Q, Liang X X 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 974
- [18] Miller R C, Kleinmann D A, Tsang W T, Gossard A C 1981 *Phys. Rev. B* **24** 1134
- [19] Greene R L, Bajaj K K, Phelps D E 1984 *Phys. Rev. B* **29** 1807
- [20] Miller D A, Chemla D S, Damen T D, Gossard A C, Wiegmann W, Wood T, Burrus C A 1985 *Phys. Rev. B* **32** 1043
- [21] Zheng R S, Matsuura M 1997 *Phys. Rev. B* **56** 2058
- [22] Andreani L C, Pasquarello A 1990 *Phys. Rev. B* **42** 8928
- [23] Leavitt R P, Little J W 1990 *Phys. Rev. B* **42** 11744
- [24] Antonelli A, Cen J, Bajaj K K 1996 *Semicond. Sci. Technol.* **11** 74
- [25] Chen R, Bajaj K K 1997 *Phys. Stat. Sol. (b)* **199** 417
- [26] Zhao G J, Liang X X, Ban S L 2003 *Mod. Phys. Lett. B* **17** 863
- [27] He X F 1991 *Phys. Rev. B* **43** 2063
- [28] Mathieu H, Lefebvre P, Christol P 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4092
- [29] de Dios-Leyva M, Bruno-Alfonso A, Matos-Abiague A, Oliveira L E 1997 *J. Phys. : Condens. Matter* **9** 8477
- [30] Wang Z P, Liang X X, Wang X 2007 *Phys. J. B* **59** 41
- [31] Matos-Abiague A 2002 *Semicond. Sci. Technol.* **17** 150
- [32] Mayes A, Yasan A, McClintock R, Shiell D, Darvish S R, Kung P, Razegh M 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 1046
- [33] Koga T, Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H, 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 046801
- [34] Mathieu H, Lefebvre P, Christol P 1992 *Phys. Rev. B* **46** 4092
- [35] Wang Z P, Liang X X 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 2367
- [36] Oshiro K, Akai K, Matsuura M 2002 *Phys. Rev. B* **66** 153308

Excitons and effects of phonons on excitons in asymmetric square quantum well^{*}

Deng Yan-Ping Lü Bin-Bin Tian Qiang[†]

(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)

(Received 27 October 2009; revised manuscript received 30 November 2009)

Abstract

By LLP(Lee-Low-Pines)-like transformation and fractional-dimension variational treatment, the ground-state energies of excitons confined in $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ asymmetric square quantum well and the influence of phonons are demonstrated. The exciton ground-state energy has a minimum value with the increasing well width. And we make clear the effects of the barrier height on the fractional dimension, exciton ground energy and binding energy. After taking into account of the interaction of exciton with LO-phonons, the values of the exciton ground-state energies increase remarkably. Moreover, the exciton binding energy increases as the asymmetric well-width decreases or the barrier height increases.

Keywords: asymmetric square quantum well, exciton, phonons, ground-state energy

PACC: 7135, 7138

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No.10574011).

[†] Corresponding author. E-mail: qtian@bnu.edu.cn