

# 磁场和量子点尺寸对激子性质的影响\*

沈曼<sup>1)</sup> 张亮<sup>2)</sup> 刘建军<sup>1)3)†</sup>

1) (河北师范大学物理科学与信息工程学院, 河北省新型薄膜材料实验室, 石家庄 050024)

2) (河北师范大学应用信息技术系, 石家庄 050024)

3) (石家庄学院物理系, 石家庄 050035)

(2012年5月3日收到; 2012年6月4日收到修改稿)

在  $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$  量子点中, 采用一维等效势模型和有限差分法理论计算了激子态的性质, 得到了激子跃迁能和束缚能随磁场、横向束缚强度以及量子点尺寸的变化关系. 结果表明: 加入磁场后, Zeeman 效应使得激子的能级简并度解除, 激子的基态跃迁能与实验符合得很好; 横向束缚强度或磁场强度的增加使得激子的束缚增强; 量子点的尺寸对激子的束缚产生重要的影响; 通过电子-空穴间平均距离以及激子体系波函数分布图像分析了其产生的物理机制.

**关键词:** 激子, 量子点, 磁场

**PACS:** 71.35.Ji, 73.21.La, 73.22.Gk

## 1 引言

近年来, 凝聚态物理的飞速发展在诸如材料科学、信息科学等领域产生了深刻的影响. 其中, 基于半导体光学和电子学特性的半导体器件更是处于举足轻重的地位. 在小尺度下实现对器件物理特性的操控是半导体技术的重要研究方向. 随着新型材料生长技术和精细加工工艺的不断进步, 以量子点为代表的低维纳米结构成为研究的热点领域. 量子点因其三维方向受限被看作是“人造原子”, 但其尺寸比自然界中的原子大得多, 因此可以实现对量子点的形状、尺寸及成分等性质的调控. 在量子点中, 激子因其独特的发光特性而在理论和实验上广泛研究<sup>[1-4]</sup>. Belhadj 等<sup>[1]</sup> 在实验上观察了无外场时量子点中激子本征态的光学调控性质; Xiao<sup>[2]</sup> 利用变分法计算了球形量子点中激子的束缚能随磁场和量子点尺寸的变化; Gu 和 Liang<sup>[3]</sup> 使用矩阵对角化方法研究了高斯形量子点中激子

的能谱, 等等. 除此之外, 随着固态量子计算, 尤其是基于半导体材料的固态量子计算理论的发展, 也使得量子点中激子的研究越发受到人们的高度关注<sup>[5,6]</sup>.

在我们的模型中,  $x$ - $y$  平面上载流子受到抛物势的束缚, 抛物势可以很好地模拟多种自组织生长量子点<sup>[7,8]</sup>; 沿着  $z$  方向外加磁场, 并且载流子受到有限深势阱的作用. 由于激子体系中电子和空穴之间的库仑相互作用存在奇点, 使得薛定谔方程的求解更加困难. Bednarek 等<sup>[9]</sup> 2003 年提出了一维有效势模型, 其结果与三维变分法所得结果符合得很好. 目前, 求解薛定谔方程的数值研究方法主要集中在变分法<sup>[10-13]</sup>、矩阵对角化法<sup>[14-16]</sup> 和蒙特卡罗模拟法<sup>[17,18]</sup>. 利用一维有效势模型和有限差分法, 我们已经研究了量子线中杂质<sup>[19]</sup> 和激子复合物<sup>[20]</sup> 的性质以及双量子点中激子<sup>[21]</sup> 的性质, 所得结果与实验符合得很好. 为了避免寻找尝试波函数和大矩阵对角化所带来的困难, 本文利用有限差分法求解激子在量子点体系中的薛定谔方程.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 61176089) 和河北省自然科学基金 (批准号: A2011205092) 资助的课题.

† E-mail: liujj@hebtu.edu.cn

## 2 理论模型

激子由一个电子和一个空穴组成, 横向(垂直于量子点生长方向)受到抛物势的束缚, 沿纵向(量子点生长方向)外加均匀磁场  $\mathbf{B}$ , 在  $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}$  和  $\text{GaAs}$  组成的异质结中, 导带和价带的禁带宽度即是电子和空穴在纵向受到的束缚势强度, 即

$$V_i(z_i) = \begin{cases} 0 & |z_i| \leq \frac{W}{2}, \\ V_i & |z_i| > \frac{W}{2}, \end{cases} \quad (1)$$

这里,  $i = e, h$  表示电子和空穴,  $W$  是量子阱的宽度. 为了计算方便, 我们没有考虑材料的介电常数不连续性和有效质量不匹配性. 这样, 激子体系的哈密顿可以写作:

$$\begin{aligned} H_X = & \frac{1}{2m_e^*} \left( \mathbf{p}_e + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{1}{2m_h^*} \left( \mathbf{p}_h - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \\ & + \frac{1}{2} m_e^* \omega_e^2 (x_e^2 + y_e^2) + \frac{1}{2} m_h^* \omega_h^2 (x_h^2 + y_h^2) \\ & + V_e(z_e) + V_h(z_h) - \frac{e^2}{\varepsilon r_{eh}} + \mu_B g_e^* \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_e \\ & - \mu_B g_h^* \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_h, \end{aligned} \quad (2)$$

其中,  $m_e^*$  和  $m_h^*$  是电子和空穴的有效质量;  $\mathbf{A}$  是电磁矢势, 采用库仑规范时  $\mathbf{A} = 1/2 \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ ;  $\omega_e$  和  $\omega_h$  是横向谐振子势的圆频率;  $\varepsilon$  是介电常数;  $r_{eh} = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2}$  是电子和空穴之间的距离; 激子哈密顿的最后两项是 Zeeman 能项, 用来描写载流子的自旋和磁场之间的相互作用, 其中  $\mu_B$  是玻尔磁子,  $g_e^*$  和  $g_h^*$  分别是电子和空穴的有效回转磁比;  $\mathbf{S}_e$  和  $\mathbf{S}_h$  是电子和空穴的自旋矢量算符.

利用一维等效势模型<sup>[9]</sup>, 假设横向束缚比纵向束缚强得多, 激子的波函数  $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$  可以利用分离变量法写为横向波函数  $\psi(x_e, y_e, x_h, y_h)$  和纵向波函数  $\varphi(z_e, z_h)$  的乘积, 即

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi(x_e, y_e, x_h, y_h) \varphi(z_e, z_h). \quad (3)$$

只考虑体系的最低能态, 体系的横向波函数具有解析的形式:

$$\begin{aligned} & \psi(x_e, y_e, x_h, y_h) \\ = & \frac{m_e^*}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{\omega_e \omega_h}{\sigma}} \exp \left[ -\frac{m_e^* \omega_e}{2 \hbar} (x_e^2 + y_e^2) \right. \\ & \left. - \frac{m_e^* \omega_h}{2 \sigma \hbar} (x_h^2 + y_h^2) \right], \end{aligned} \quad (4)$$

其中,  $\sigma = \frac{m_e^*}{m_h^*}$  是电子和空穴的有效质量比;

$$\omega_{eB} = \sqrt{\frac{e^2 B^2}{4m_e^{*2} c^2} + \omega_e^2} \quad \text{和} \quad \omega_{hB} = \sqrt{\frac{\sigma^2 e^2 B^2}{4m_e^{*2} c^2} + \omega_h^2}$$

分别是电子和空穴的有效振动圆频率, 它包括了抛物势和磁场对圆频率的双重影响. 用波函数 (4) 式对激子哈密顿 (2) 式的横向自由度求平均值, 可以得到沿量子点生长方向的一维有效哈密顿:

$$\begin{aligned} H_X^{\text{eff}} = & E_e + E_h - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\sigma \hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} \\ & + V_e(z_e) + V_h(z_h) + \mu_B g_e^* B S_{ez} \\ & - \mu_B g_h^* B S_{hz} - V_{\text{eff}}(z_e - z_h), \end{aligned} \quad (5)$$

这里,

$$E_e = \hbar \sqrt{\frac{e^2 B^2}{4m_e^{*2} c^2} + \omega_e^2} \quad \text{和} \quad E_h = \hbar \sqrt{\frac{\sigma^2 e^2 B^2}{4m_e^{*2} c^2} + \omega_h^2}$$

是单电子和单空穴在体系中的横向基态能;  $V_{\text{eff}}(z_e - z_h)$  是电子和空穴之间的一维有效库仑相互作用能:

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(z_e - z_h) = & \frac{e^2 \sqrt{\pi}}{\varepsilon \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_{eB}} + \frac{\sigma \hbar}{m_e^* \omega_{hB}}}} \times \text{erfc}x \\ & \times \left( \frac{|z_e - z_h|}{\sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_{eB}} + \frac{\sigma \hbar}{m_e^* \omega_{hB}}}} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $\text{erfc}x(x) = \exp(x^2) \text{erfc}(x)$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(x^2) \int_x^\infty x \exp(-t^2) dt$$

是标度误差补偿函数; 电子的自旋角动量  $z$  分量  $S_{ez}$  取  $\pm 1/2$ , 重空穴的自旋角动量  $z$  分量  $S_{hz}$  取  $\pm 3/2$ , 那么激子态  $z$  分量的总角动量  $m_z = \pm 1, \pm 2$ , 这些双重态间的自旋劈裂能可表示为:  $\Delta E_{\pm 1} = |g_e^* + 3g_h^*| \mu_B B$  和  $\Delta E_{\pm 2} = |g_e^* - 3g_h^*| \mu_B B$ .

那么激子哈密顿 (5) 式的本征值可以通过本征方程

$$H_X^{\text{eff}} \varphi(z_e, z_h) = E_X \varphi(z_e, z_h) \quad (7)$$

得到,  $E_X$  就是激子的基态能量. 方程 (7) 的求解与电子和空穴的纵向坐标有关, 因此我们选择二维网格的有限差分法进行数值计算, 可以得到激子体系的基态能和基态波函数. 定义激子的束缚能为

$$E_b = E(e) + E(h) - E_X, \quad (8)$$

其中,  $E(e)$  和  $E(h)$  分别是电子和空穴在量子点中的基态能量. 利用激子的波函数可以得到电子和空穴在  $z$  方向上的平均距离:

$$\langle z_{eh} \rangle = \frac{\iint \varphi^*(z_e, z_h) |z_e - z_h| \varphi(z_e, z_h) dz_e dz_h}{\iint \varphi^*(z_e, z_h) \varphi(z_e, z_h) dz_e dz_h} \quad (9)$$

### 3 结果与讨论

在计算中,  $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$  量子点中载流子各参数选取如下 [22]:  $m_e^* = 0.0404m_0$  ( $m_0$  是自由电子质量),  $m_h^* = 0.350m_0$ ,  $g_e^* = -0.81$ ,  $g_h^* = -0.74$ ,  $\varepsilon = 15.0$ ,  $V_e = 468 \text{ meV}$ ,  $V_h = 230 \text{ meV}$ . 为了保证有限差分法的计算精度, 我们选取  $500 \times 500$  的二维网格.

图 1 给出了  $\hbar\omega_e = \hbar\omega_h = 160.3 \text{ meV}$ ,  $W = 5.0 \text{ nm}$  时激子的基态跃迁能  $E_t$  和自旋劈裂能  $\Delta E$  与磁场的关系, 实心点线是我们的理论计算结果, 空心点是文献 [22] 中的实验数据. 从图 1(a) 中可以看到, 重空穴激子在磁场为零时能量是四重简并的, 当加入磁场后, 由于载流子自旋与磁场的相互作用, 即 Zeeman 效应的出现使得激子的能量简并度被解除. 在  $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$  量子点中, 当电子和空穴的自旋分别取  $1/2$  和  $-3/2$  时, 激子的 Zeeman 能导致激子具有最低的能量值; 并且随着磁场的增加, 体系的基态能减小, 光谱出现红移, 当  $B > 6 \text{ T}$  时, 它几乎是一个常数, 这是因为此时 Zeeman 能的变化与反磁位移几乎是相等的. 从图 1(b) 的计算结果可以看出, 两条自旋劈裂能线都随磁场的增加而呈线性增加. 当  $B = 8 \text{ T}$  时, 对应两条强谱线之间的自旋劈裂能  $\Delta E_{\pm 1} = 1.3984 \text{ meV}$ , 而对应两条弱谱线之间的自旋劈裂能  $\Delta E_{\pm 2}$  只有  $0.6483 \text{ meV}$ . 事实上, 对于激子, 自旋平行态间的跃迁在光学上是不允许的, 也就是说,  $m_z = \pm 2$  的激子态不是明亮的态. 此外, 从  $\Delta E_{\pm 1}$  随磁场变化的斜率还可以得到激子的有效回转磁比  $g_X^* = 3.0198$ . 我们得到的这些理论结果与实验 [22] 符合得很好.

图 2(a) 给出了量子点宽度  $W = 5 \text{ nm}$  时激子的束缚能随横向束缚势强度的变化情况. 从图中可以看出, 在  $B = 0, 20, 40 \text{ T}$  三种情况时, 激子的束缚能都随横向束缚的增强而单调增加, 这是因

为横向束缚的增加使得电子和空穴所受到的束缚增强, 从而增大了它们之间的库仑相互作用, 导致了激子体系的束缚能增强. 由于沿  $z$  方向的外加磁场对于载流子横向运动的作用与抛物势相同, 因此磁场越强, 束缚能也就越大, 这一点也可以从图 2(b) 中看出来. 并且, 在横向束缚较弱的时候, 磁场对于激子束缚能的影响比较明显, 随着横向束缚逐渐增强, 不同磁场下的激子束缚能的差别越来越小.

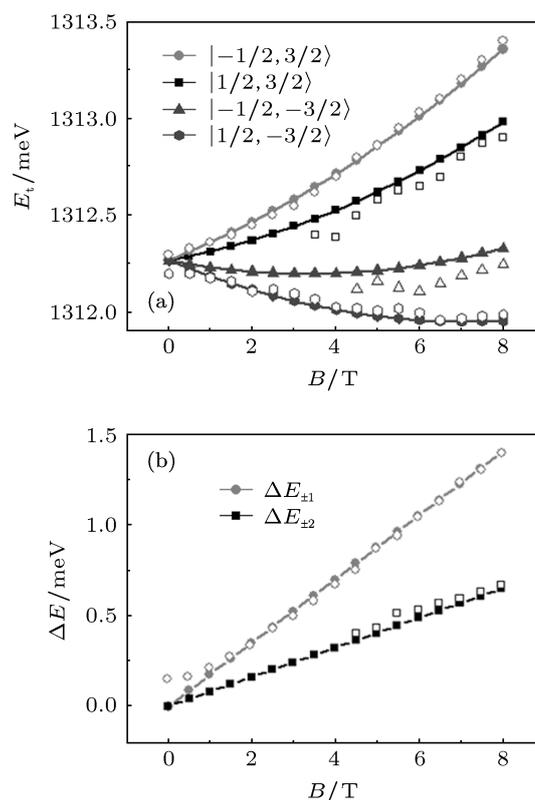


图 1 激子的基态跃迁能 (a) 和自旋劈裂能 (b) 与磁场的关系, 实心点是理论计算结果, 空心点是实验结果 [22]

从图 3(a) 中可以看到, 激子的束缚能随量子点宽度的增加先增大后减小. 这是因为, 当量子点的宽度很小时, 体系对于载流子的束缚作用很强, 但电子和空穴很容易隧穿到垒中, 使得电子和空穴之间的平均距离较大 (见图 3(b)), 束缚能较小; 当量子点尺寸增大后, 体系对于电子和空穴的束缚逐渐减弱, 与此同时, 载流子的隧穿概率也在逐渐减小, 电子和空穴同时位于量子点中的概率增加, 导致电子-空穴间的平均距离减小, 激子体系的束缚能增加, 在  $W = 2.8 \text{ nm}$  时激子束缚能出现最大值, 电子-空穴间平均距离出现最小值; 继续增加量子点

尺寸后, 电子和空穴隧穿概率越来越小, 量子点尺寸对于激子的束缚起到了主要的作用, 所以, 量子点宽度越大, 体系的束缚强度越小, 激子体系的束缚能也就越小. 对于上面的解释, 从图 3(c) 中可以

得到更好的理解. 此外, 从图 3(c) 中还可以看到, 电子的隧穿能力要比重空穴的强很多, 这是因为隧穿概率和载流子的有效质量有关, 载流子有效质量越大, 隧穿概率越小.

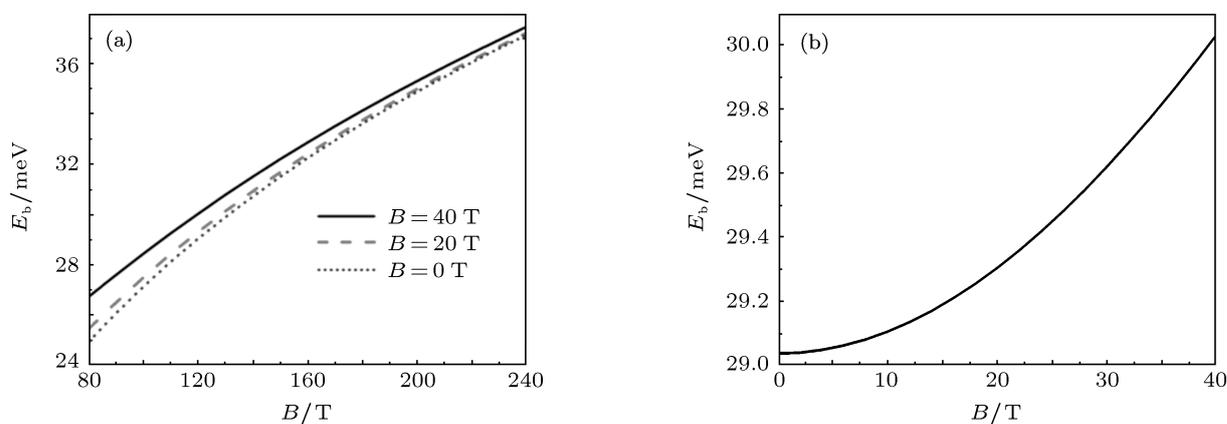


图 2  $W = 5 \text{ nm}$  时, (a) 激子基态束缚能与横向束缚强度的关系, 实线、虚线和点线分别对应  $B = 40, 20, 0 \text{ T}$ ; (b)  $\hbar\omega_e = \hbar\omega_h = 120 \text{ meV}$  时激子基态束缚能与磁场的关系

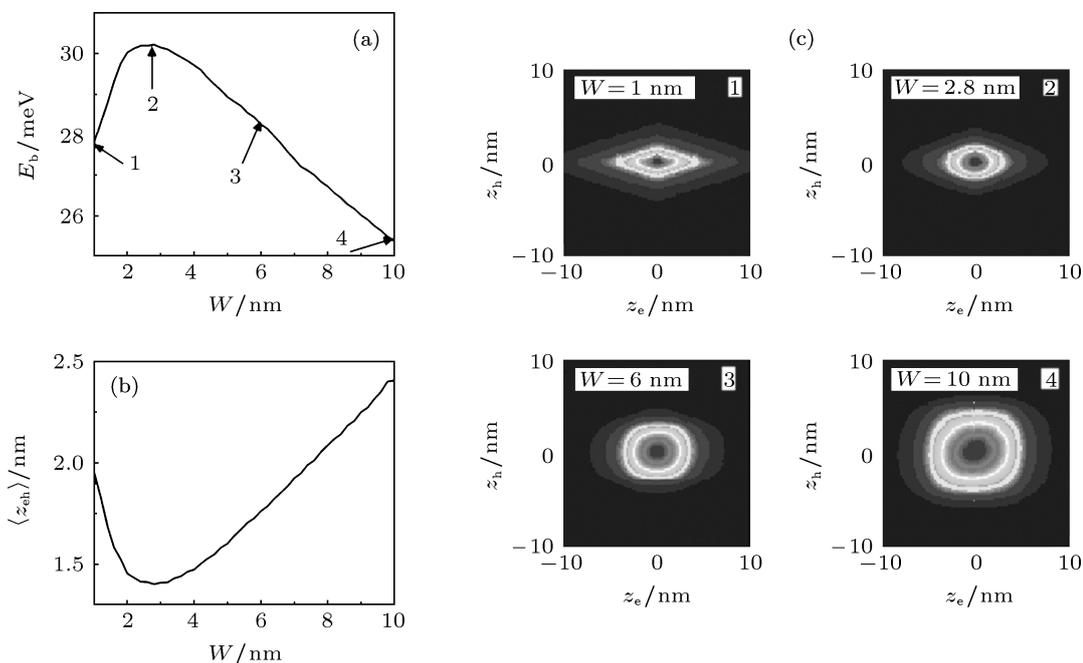


图 3  $B = 8 \text{ T}$ ,  $\hbar\omega_e = \hbar\omega_h = 120 \text{ meV}$  时, 激子基态束缚能 (a) 和电子-空穴间平均距离 (b) 与量子点宽度  $W$  的关系; (c) 为  $W = 1, 2.8, 6, 10 \text{ nm}$  四种情况时激子波函数随电子和空穴坐标的变化情况

## 4 结论

本文对  $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$  量子点中的激子态

进行了研究, 并发展了激子态的理论和计算方法. 计算结果表明: 重空穴激子的跃迁能在磁场与载流子自旋的相互作用下发生劈裂, 使得无磁场时激子

能级的四重简并度被解除; 当增加横向束缚强度和外加磁场时, 体系对于载流子的束缚增强, 激子的束缚能亦增强; 在改变量子点的宽度后, 激子体系的束缚能发生明显的变化, 这说明量子点的尺寸对

激子的束缚会产生重要的影响. 我们的理论结果合理地解释了文献 [22] 的实验结果, 并为可操控的光电器件设计和应用提供了物理模型和理论依据.

- 
- [1] Belhadj T, Simon C M, Amand T, Renucci P, Chatel B, Krebs O, Lemaitre A, Voisin P, Marie X, Urbaszek B 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 086601
- [2] Xiao Z G 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 4509
- [3] Gu J, Liang J Q 2004 *Phys. Lett. A* **323** 132
- [4] Bennett A J, Pooley M A, Stevenson R M, Ward M B, Patel R B, Giroday A B, Sköld N, Farrer I, Nicoll C A, Ritchie D A, Shields A J 2010 *Nature Phys.* **6** 947
- [5] Ortner G, Bayer M, Larionov A, Timofeev V B, Forchel A, Lyanda Y B, Reinecke T L, Hawrylak P, Fafard S, Wasilewski Z 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 086404
- [6] Bayer M, Hawrylak P, Hinzer K, Fafard S, Korkusinski M, Wasilewski Z R, Stern O, Forchel A 2001 *Science* **291** 451
- [7] DiVincenzo D P, Bacon D, Kempe J, Burkard G, Whaley K B 2000 *Nature* **408** 339
- [8] Rinaldi R, Mangino R, Cingolani R, Lipsanen H, Sopanen M, Tulkki J, Brasken M, Ahopelto J 1998 *Phys. Rev. B* **57** 9763
- [9] Bednarek S, Szafran B, Chwiej T, Adamowski J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 045328
- [10] Nair S V, Sinha S, Rustagi K C 1987 *Phys. Rev. B* **35** 4098
- [11] Kayanuma Y 1988 *Phys. Rev. B* **38** 9797
- [12] Xia J B 1989 *Phys. Rev. B* **40** 8500
- [13] Ramaniah L M, Nair S V 1993 *Phys. Rev. B* **47** 7132
- [14] Hu Y Z, Lindberg M, Koch S W 1990 *Phys. Rev. B* **42** 1713
- [15] Li S S, Xia J B 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 022102
- [16] Dong Q R, Niu Z C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1794 (in Chinese) [董庆瑞, 牛智川 2005 物理学报 **54** 1794]
- [17] Harju A, Sverdlov V A, Nieminen R M 1998 *Europhys. Lett.* **41** 407
- [18] Filinov A V, Riva C, Peeters F M, Lozovik Y E, Bonitz M 2004 *Phys. Rev. B* **70** 035323
- [19] Zhai L X, Liu J J 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 053706
- [20] Zhang H, Shen M, Liu J J 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 043705
- [21] Shen M, Liu J J 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 094313
- [22] Bayer M, Kuther A, Forchel A, Gorbunov A, Timofeev V B, Schafer F, Reithmaier J P, Reinecke T L, Walck S N 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1748

# Effects of magnetic field and quantum dot size on properties of exciton\*

Shen Man<sup>1)</sup> Zhang Liang<sup>2)</sup> Liu Jian-Jun<sup>1)3)†</sup>

1) (College of Physical Science and Information Engineering, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China)

2) (Department of Application Information Technology, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050024, China)

3) (Physics Department, Shijiazhuang University, Shijiazhuang 050035, China)

(Received 3 May 2012; revised manuscript received 4 June 2012)

## Abstract

In  $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum dot, using a one-dimensional effective potential model and the finite difference method, we theoretically study the properties of an exciton under the influence of an applied magnetic field, such as the transition energy, the binding energy, the spatial distributions of the electron and the hole. The effects due to the applied magnetic field and the quantum confinement on the binding energy are analyzed, and the following results are obtained: the ground state transition energy of the heavy-hole exciton can split into four energy levels due to the Zeeman effect, of which the results are in good agreement with experimental results; the binding energy increases monotonically with the increase of lateral confinement or magnetic field; the size of the quantum dot has a significant influence on the binding energy of the exciton, which can be seen both from the average distance between the electron and the hole and from the wave function distributions of the exciton.

**Keywords:** exciton, quantum dot, magnetic field

**PACS:** 71.35.Ji, 73.21.La, 73.22.Gk

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61176089), and the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. A2011205092).

† E-mail: liujj@hebtu.edu.cn