

外电场对 InGaAsP/InP 量子阱内激子结合能的影响*

王文娟¹⁾ 王海龙^{1)†} 龚谦²⁾ 宋志棠²⁾ 汪辉³⁾ 封松林³⁾

1) (山东省激光偏光与信息技术重点实验室, 曲阜师范大学物理系, 曲阜 273165)

2) (中国科学院上海微系统与信息技术研究所信息功能材料国家重点实验室, 上海 200050)

3) (中国科学院上海高等研究院, 上海 201203)

(2013年7月25日收到; 2013年9月2日收到修改稿)

在有效质量近似下采用变分法计算了 InGaAsP/InP 量子阱内不同 In 组分下的激子结合能, 分析了结合能随阱宽和 In 组分的变化情况, 并且讨论了外加电场对激子结合能的影响. 结果表明: 激子结合能是阱宽的一个非单调函数, 随阱宽的变化呈现先增加后减小的趋势; 随着 In 组分增大, 激子结合能达到最大值的阱宽相应变小, 这与材料的带隙改变有关; 在一定范围内电场的存在对激子结合能的影响很小, 但电场强度较大时会破坏激子效应.

关键词: 激子, InGaAsP/InP 量子阱, 结合能, 电场

PACS: 71.35.-y, 73.21.Fg, 78.67.De

DOI: 10.7498/aps.62.237104

1 引言

光电子是信息产业中的重要领域, 在有源发光器件中, 激子发光占据重要地位. 器件应用的牵引作用, 极大地促进了人们对激子的广泛研究^[1-5]. 激子在固态量子信息中也具有潜在应用, 激子态可以作为量子信息的有效载体, 制备各种理想激子态并对其进行相干控制对基础和应用研究都有重要意义. 最近 High 等^[6] 在冷“激子气”中观察到了激子的凝聚态现象, 为固态量子信息的处理提供了理想基态.

随着低维材料生长及加工技术的迅速发展, 利用金属化学气相沉淀和分子束外延等方法相继生长出各种低维半导体结构^[7-9], 其中量子阱结构由于在光电器件中的广泛应用被大量研究. 量子阱等低维结构材料内的量子约束效应对材料体系具有非常重要的影响, 增强了粒子间的库仑相互作用, 使得激子结合能相应变大, 因此激子效应在量子阱等结构制作的发光器件中占据重要地位^[10-12]. 为此人们开展了大量对低维半导体结构中激子以及

激子结合能方面理论和实验研究工作, 包括激子的极化、跃迁、光学增益等^[13-17].

利用体材料与量子阱作为激活区, InP 基材料系统可以涵盖光纤通信的全部波长, 目前光通信波段用的材料主要集中在以 InP 为基片的 InGaAsP 和 GaAlInAs 体系. InGaAsP/InP 量子阱材料具有较高的晶体对称性和较大的饱和电子漂移速率, 通过外加电场可以改变其电学性能, 应用于半导体光电子器件方面有很大优势^[18,19]. 在前面的工作中, 我们在有效质量近似下, 利用变分法对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 阶梯量子阱中氢施主杂质束缚能进行了理论计算, 并研究了外加电场和阶梯阱的高度对阶梯量子阱中氢施主杂质电子态特性的影响^[20]. 而对这类材料结构中激子结合能的计算还很少报道, 所以对 InGaAsP/InP 量子阱内激子结合能的研究具有重要意义.

有效质量和包络函数近似是简单有效的计算异质结构或微结构电子态的工具, 被人们广泛采用^[21-25]. 本文在有效质量近似下利用变分法对 InGaAsP/InP 量子阱内激子结合能以及电场对激子结合能的影响进行相关计算, 为 InGaAsP/InP 量子

* 国家自然科学基金 (批准号: 60976015, 61176065)、山东省自然科学基金 (批准号: ZR2010FM023) 和信息功能材料国家重点实验开放课题资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hlwang@mail.qfnu.edu.cn

阱内激子发光及其发光器件的设计和制作提供一定的理论依据.

2 理论框架

考虑加电场情况下激子在单量子阱中运动, 选取材料生长方向沿 z 轴正方向, 激子系统的哈密顿量可表示为

$$H = H_e + H_h + H_{e-h}, \quad (1)$$

利用有效质量近似, 自由电子和空穴在势阱中运动的哈密顿量 H_e 和 H_h 为

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V_{CB}(z_e) - eFz_e, \quad (2)$$

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_{VB}(z_h) + eFz_h, \quad (3)$$

其中 m_e^* , m_h^* 分别代表电子和空穴的有效质量. 取量子阱的中心为坐标原点, 阱宽为 L_w , 那么,

$$V_{CB}(z_e) = \begin{cases} 0, & |z_e| < L_w/2, \\ V_{CB}, & |z_e| > L_w/2, \end{cases} \quad (4)$$

$$V_{VB}(z_h) = \begin{cases} 0, & |z_h| < L_w/2, \\ V_{VB}, & |z_h| > L_w/2. \end{cases} \quad (5)$$

另外, (1) 式中电子和空穴的相互作用项 H_{e-h} 包括电子和空穴在 x - y 平面内的相对移动 (垂直于 z 轴) 以及库仑势能, 表示为

$$H_{e-h} = \frac{P_{\perp}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r}, \quad (6)$$

其中 μ 是垂直于 z 轴平面的激子折合质量, $1/\mu = 1/m_e + 1/m_h$. P 是相对运动平面内的动量算符,

$$P_{\perp}^2 = -\hbar^2(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2).$$

ϵ 是材料的介电常数; r 是电子和空穴的分离,

$$r^2 = (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2.$$

选取试探波函数为^[26]

$$\Psi = \psi_e(z_e)\psi_h(z_h)\exp\left(-\frac{r'}{\lambda}\right), \quad (7)$$

其中玻尔半径 λ 是变分参数, r' 代表相对运动项, 表示为

$$r'^2 = (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + \zeta^2(z_e - z_h)^2, \quad (8)$$

ζ 也是变分参数, 令 $(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 = r_{\perp}^2$, $|z_e - z_h| = a$, 那么,

$$r'^2 = r_{\perp}^2 + \zeta^2 a^2, \quad (9)$$

$\psi_e(z_e)$ 和 $\psi_h(z_h)$ 只是异质结构中一个质点哈密顿量的本征函数, 满足方程

$$H_e\psi_e(z_e) = E_e\psi_e(z_e), \quad (10a)$$

$$H_h\psi_h(z_h) = E_h\psi_h(z_h). \quad (10b)$$

试探波函数这个形式的一个主要优势是它与一个质点的哈密顿量 H_e 和 H_h 的形式无关, 并且可以在能计算标准电子和空穴波函数的任何系统上进行.

由上已知系统的哈密顿量和波函数, 那么薛定谔方程可以写为

$$H\Psi = E\Psi. \quad (11)$$

总激子能的期望值

$$E = \min_{\lambda, \beta} \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (12)$$

ζ 与 β 之间的关系为

$$\zeta^2 = 1 - \beta^2. \quad (13)$$

方程成立的前提是 $0 \leq \zeta \leq 1$, 并且 $0 \leq \beta \leq 1$.

激子结合能 E_b 满足

$$E = E_e + E_h + E_b. \quad (14)$$

3 数值结果及讨论

这里我们对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 量子阱中的重空穴激子进行计算. 材料中各个参量的取值与 In 组分 x 以及 As 组分 y 的变化关系式为

$$m_e^* = 0.158 - 0.081x - 0.0948y + 0.0391xy,$$

$$m_h^* = 0.54 + 0.02x - 0.04y - 0.0028xy,$$

$$\epsilon = 11.1 + 1.25x + 2.08y + 0.12xy.$$

带阶取 67:33^[27].

图 1 所示为 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 量子阱中 x 取 0.53, y 分别取 0.6, 0.8, 1.0 时激子结合能随阱宽的变化. 图 2(a) 给出了 y 取 1.0, In 组分分别为 0.30, 0.40, 0.53 时, 激子结合能 E_b 随阱宽 L_w 的变化情况. 可以看出激子结合能是阱宽的一个非单调函数, 这取决于阱宽对电子和空穴的限制效应. 阱宽较小时, 体系的波函数向垒中的渗透较多, 所以激子结合能较小; 随着阱宽的增加并达到一定值时, 库仑势和量子限制势对体系的作用达到最大, 激子结合

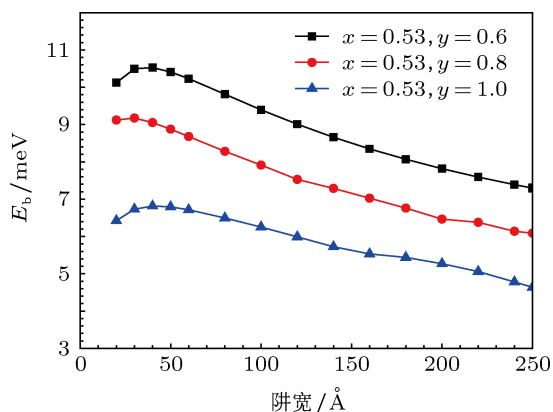


图1 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 量子阱内激子结合能的变化情况

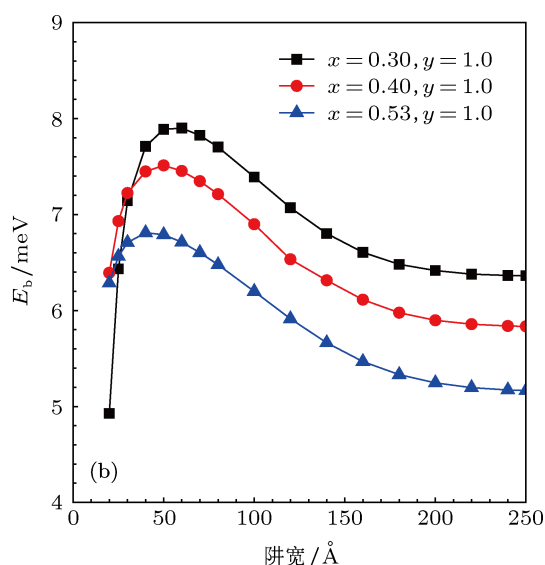
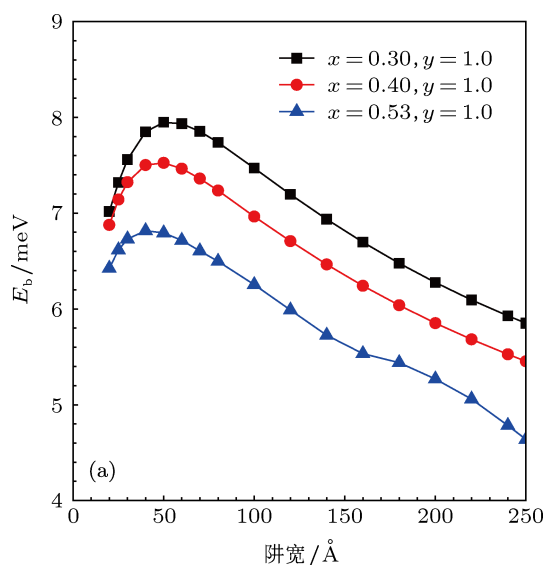


图2 不同 In 组分下激子结合能随阱宽的变化 (a) $F=0$; (b) $F=50 \text{ kV/cm}$

能出现极大值; 阱宽继续增加, 此时由于电子和空穴之间的库仑相互作用, 体系波函数主要集中在阱内, 库仑势是主要因素, 由于量子限制势减小, 结合

能逐渐减小. 这种激子结合能随阱宽变化的趋势与文献 [28] 中采用二维有效质量近似计算结果一致, 在实验上也得到了验证 [29]. 此外 In 组分含量不同, 极大值出现的位置也有变化: 随着 In 组分含量增加, 使得材料的带隙相应减小, 这就使得势垒的高度相对增加, 量子限制势增大, 因此极大值所需要的阱宽变小. 图 3 给出了与图 2(a) 相对应情况下玻尔半径 λ 的变化情况. 可以看出随着阱宽的增加, 玻尔半径的变化也呈现非单调性的变化. 但是玻尔半径随阱宽的变化趋势与结合能的变化趋势正好相反. 这是因为激子所受的限制作用越大, 粒子间的距离越小. 图 2(b) 给出外加 50 kV/cm 的电场后不同 In 组分下量子阱内激子结合能随阱宽的变化, 可以看出电场对激子结合能的影响不是很大.

为了进一步看出电场对激子结合能的影响, 图 4 给出了电场为 0 与 50 kV/cm 两种情况下激子结合能之间的差. 得到总体情况电场对激子结合能的影响不是很明显. 但是在阱宽较小时, 加电场后激子结合能减小 0.5 meV 到 2 meV 左右. 这是因为在阱宽较小时, 由于电场的作用, 导致波函数向势垒中的渗透增多, 使得激子结合能变小.

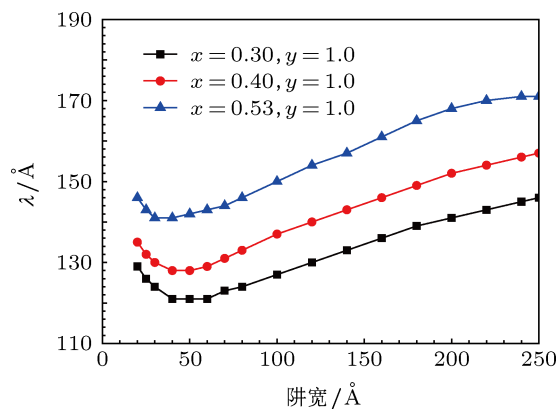


图3 玻尔半径 λ 随阱宽的变化

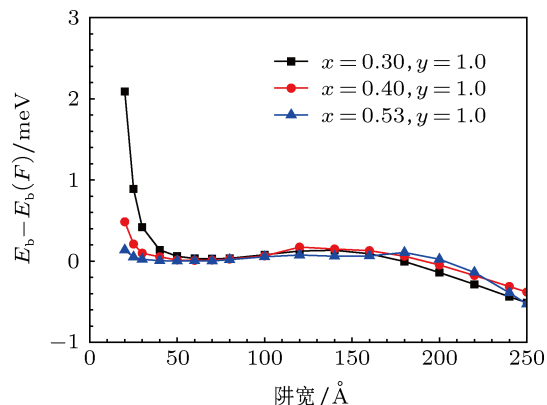


图4 不加电场与加 50 kV/cm 电场后结合能的能量差

图 5 计算了 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱在不同电场下激子结合能随阱宽的变化. 电场在一定范围内增大, 对激子结合能影响并不大, 但是当外加电场较大时, 激子结合能会变得很小. 这是因为在电场作用下, 电子和空穴向相反方向运动, 电场较大时电子和空穴受电场影响较大, 玻尔半径变大, 使得激子效应减弱, 所以激子结合能变得很小.

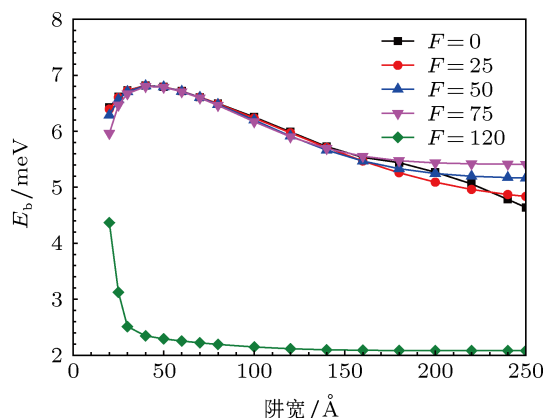


图 5 不同电场下 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱内激子结合能的变化情况

图 6 给出了阱宽从 50 Å 到 250 Å 变化时, $\text{In}_{0.47}\text{Ga}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱内激子结合能随电场的变化关系曲线. 从图中可以看出阱宽较大时, 电场对激子结合能有一定程度的影响. 这是因为阱宽较大时, 激子受到的约束势较小, 库仑作用较弱, 导致电子和空穴之间的作用较容易改变, 所以此时激子结合能较容易受到电场的影响. 而阱宽为 50 Å 时, 激子结合能最大, 而且受电场影响很小, 非常稳定.

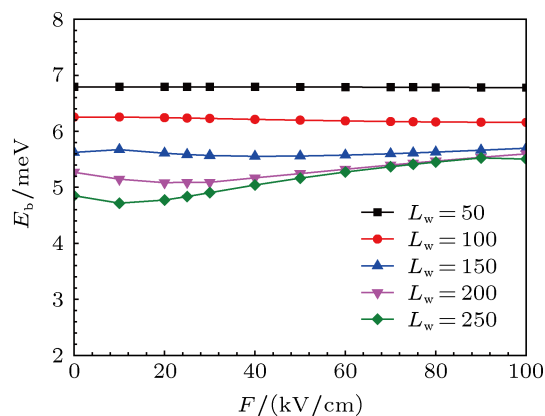


图 6 不同阱宽下 $\text{In}_{0.47}\text{Ga}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ 量子阱内的激子结合能随电场的变化

4 结论

在有效质量近似下采用变分法计算了 $\text{InGaAsP}/\text{InP}$ 量子阱内的激子结合能随阱宽、 In 组分的变化情况, 同时讨论了外加电场对激子体系结合能的影响. 从计算的结果可以看出对 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ 量子阱, 由于库仑相互作用和量子约束势的共同作用, 阱宽很小时, 激子结合能随阱宽的增大而增大, 当阱宽到一定值时, 结合能出现一个峰值, 然后随阱宽的增大而减小. In 组分对激子结合能达到最大值时对应的阱宽大小有一定影响, In 组分增大, 使得材料的带隙减小, 因此达到最大值的阱宽相应变小. 在一定范围内电场对激子结合能的影响不是很大. 但是电场很大时, 电子和空穴受电场影响变大, 使得激子效应减弱. 这些结果可以为设计 $\text{InGaAsP}/\text{InP}$ 量子阱发光器件提供一定理论依据.

- [1] Turkowski V, Leonardo A, Ullrich C A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 233201
- [2] Gil B, Felbacq D, Chichibu S F 2012 *Phys. Rev. B* **85** 075205
- [3] Zhang H, Liu L, Liu J J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 0487 (in Chinese) [张红, 刘磊, 刘建军 2007 物理学报 **56** 0487]
- [4] Ha S H, Ban S L 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 085218
- [5] Kuo Y H, Li Y S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 245328
- [6] High A A, Leonard J R, Hammack A T, Fogler M M, Butov L V, Kavokin A V, Campman K L, Gossard A C 2012 *Nature* **483** 584
- [7] Schaller R D, Klimov V I, 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 186601
- [8] Albrecht K F, Wang H B, Mühlbacher L, Thoss M, Komnik A 2012 *Phys. Rev. B* **86** 081412
- [9] Wang Z J, Pedrosa H, Krauss T, Rothberg L 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 047403
- [10] You H L, Zhang C F 2009 *Chin. Phys. B* **18** 0349
- [11] Chen J, Perebeinos V, Freitag M, Tsang J, Fu Q, Liu J, Avouris P 2005 *Science* **310** 1171
- [12] Hu Z H, Huang D X 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1488 (in Chinese) [胡振华, 黄德修 2003 物理学报 **52** 1488]
- [13] Belhadj T, Simon C M, Amand T, Renucci P, Chatel B, Krebs O, Lemaître A, Voisin P, Marie X, Urbaszek B 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 086601
- [14] Li W S, Sun B Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 047801 (in Chinese) [李文生, 孙宝权 2013 物理学报 **62** 047801]
- [15] Klimov V I, Ivanov S A, Nanda J, Achermann M, Bezel I, McGuire J A, Piryatinski A 2007 *Nature* **447** 441
- [16] Dvorak M, Wei S H, Wu Z G 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 016402
- [17] Shen M, Bai Y K, An X T, Liu J J 2013 *Chin. Phys. B* **22** 047101
- [18] Tudury H A P, Nakaema M K K, Iikawa F, Brum J A, Ribeiro E, Carvalho W, Jr, Bernussi A A, Gobbi A L 2001 *Phys. Rev. B* **64** 153301
- [19] Kong D H, Zhu H L, Liang S, Qiu J F, Zhao L J 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 024201
- [20] Yin X, Wang H L, Gong Q, Feng S L 2013 *Chinese J. Quantum Elec-*

- tron **30** 236 (in Chinese) [尹新, 王海龙, 龚谦, 封松林 2013 量子电子学报 **30** 236]
- [21] Wang H L, Jiang L M, Gong Q, Feng S L 2010 *Physica B* **405** 3818
- [22] Dacal L C O, Brum J A 2002 *Phys. Rev. B* **65** 115324
- [23] Wu H T, Wang H L, Jiang L M, Gong Q, Feng S L 2009 *Physica B* **404** 122
- [24] Sivalertporn K, Mouchliadis L, Ivanov A L, Philp R, Muljarov E A 2012 *Phys. Rev. B* **85** 045207
- [25] Jiang L M, Wang H L, Wu H T, Gong Q, Feng S L 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 3017
- [26] Harrison P, Quantum Wells, Wires and Dots: *Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructure*, 2nd ed (John Wiley & Sons, New York, 2005)
- [27] Li E H 2000 *Physica E* **5** 215
- [28] Priester C, Allan G, Lannoo M 1984 *Phys. Rev. B* **30** 7302
- [29] Haines M J L S, Ahmed N, Adams S J A, Mitchell K, Agool I R, Pidgeon C R, Cavenett B C, O'Reilly E P, Ghitii A, Emeny M T 1991 *Phys. Rev. B* **43** 11944

External electric field effect on exciton binding energy in InGaAsP/InP quantum wells*

Wang Wen-Juan¹⁾ Wang Hai-Long^{1)†} Gong Qian²⁾ Song Zhi-Tang²⁾
Wang Hui³⁾ Feng Song-Lin³⁾

1) (Shandong Provincial Key Laboratory of Laser Polarization and Information Technology, Department of Physics, Qufu Normal University, Qufu 273165, China)

2) (State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics, Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China)

3) (Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201203, China)

(Received 25 July 2013; revised manuscript received 2 September 2013)

Abstract

Exciton binding energies in InGaAsP/InP quantum well with different contents of In are calculated through variational method in the effective mass approximation. The variation of exciton binding energy as a function of well width, In content, and applied external electric field is studied. It is shown that the exciton binding energy is a non-monotonic function of well width. It increases first until reaching a maximum, and then decreases as the well width increases farther. In addition, with the increase of In content, the well width should increase to reach the maximum value of exciton binding energy. It is also found that the external electric field has little effect on binding energy, but when the electric field is large enough, it will destroy the excitonic effect. These results may provide some theoretical basis for the design and control of InGaAsP/InP optical devices.

Keywords: exciton, InGaAsP/InP quantum well, binding energy, electric field

PACS: 71.35.-y, 73.21.Fg, 78.67.De

DOI: 10.7498/aps.62.237104

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60976015, 61176065), the Shandong Provincial Natural Science Foundation, China (Grant No. ZR2010FM023), and the Open Project of State Key Laboratory of Functional Materials for Informatics.

† Corresponding author. E-mail: hlwang@mail.qfnu.edu.cn