

对称 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 双量子阱中 激子的束缚能^{*}

张 红 刘 磊 刘建军[†]

(河北师范大学物理科学与信息工程学院, 石家庄 050016)

(2006 年 6 月 1 日收到, 2006 年 6 月 19 日收到修改稿)

在有效质量近似下采用简单的尝试波函数变分地计算了对称 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 双量子阱中激子体系束缚能, 研究了体系束缚能随阱宽和垒宽的变化情况. 发现双量子阱中激子体系束缚能随阱宽变化同单量子阱情况类似, 但束缚能的峰值出现在阱宽为 10Å 左右, 峰值位置小于单阱的情况, 束缚能随垒宽的增加有一极小值, 这与波函数向垒中的渗透有关.

关键词: 对称双量子阱, 激子, 束缚能

PACC: 7135, 7320D, 7115P

1. 引 言

分子束外延和金属化学气相沉积技术的发展使得制备高质量的低维半导体异质结构得以实现. 这些技术可将生长层的厚度控制在原子的量级, 当势垒层的厚度小到一定程度时, 两个相邻阱之间的耦合作用将变得非常重要, 这样就形成了超晶格或多量子阱结构. 这种半导体异质结构具有许多有趣的物理特性, 特别是在器件制备上(如红外探测器、共振隧穿二极管和弹道晶体管等)有着潜在的应用价值, 因此在理论和实验上引起了人们极大的关注^[1-6].

20 年来, 关于低维半导体结构中激子(包括双激子和束缚激子)的理论研究主要集中在单量子阱、单量子阱线和单量子点中^[7-14], 而对双量子阱中激子性质的研究并不多. 由于量子阱间存在耦合, 同单量子阱相比, 双量子阱中激子的性质将发生很大的改变. 如双量子阱中激子的光电响应速度有明显提高, 这在高速空间光调制器和高速开关上有潜在应用^[15]. 在单量子阱中, 激子体系的性质主要由阱宽和势垒高度这些物理参数和有效质量、介电常数

等材料参数决定, 而在双量子阱中还要受到垒宽的影响. 本文采用了一个参数的尝试波函数变分地计算了对称 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 双量子阱中激子的束缚能随垒宽和阱宽的变化情况, 并同单量子阱中的结果进行了比较.

2. 理论框架

我们首先考虑单粒子(电子或空穴)在阱宽为 L_w 垒宽为 L_b 的对称双量子阱中的运动, 选取材料的生长方向为 z 轴, 取垒心为坐标原点, 其哈密顿可以表示为

$$H(z) = -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{eff}}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z), \quad (1)$$

其中 m_{eff}^* 为粒子在阱(垒)中的有效质量, 粒子的量子约束势为

$$V(z) = \begin{cases} V_0, & |z| \geq L_c, |z| \leq \frac{L_b}{2}, \\ 0, & \frac{L_b}{2} < |z| < L_c, \end{cases} \quad (2)$$

其中 $L_c = L_w + L_b/2$, V_0 由 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 中 Al 的掺杂浓度 x 决定. 哈密顿(1)式的本征波函数为

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10574036), 河北省科技创新基金(批准号: 06547006D-4)资助的课题.

[†] E-mail: liujj@mail.hebtu.edu.cn

$$f(z) = \begin{cases} A \exp[\beta(z + L_c)], & z \leq -L_c, \\ -B \sin\left[\alpha\left(z + \frac{L_b}{2}\right)\right] + C \cos\left[\alpha\left(z + \frac{L_b}{2}\right)\right], & -L_c < z < -\frac{L_b}{2}, \\ \cosh(\beta z), & -\frac{L_b}{2} \leq z \leq \frac{L_b}{2}, \\ B \sin\left[\alpha\left(z - \frac{L_b}{2}\right)\right] + C \cos\left[\alpha\left(z - \frac{L_b}{2}\right)\right], & \frac{L_b}{2} < z < L_c, \\ A \exp[-\beta(z - L_c)], & z \geq L_c, \end{cases} \quad (3)$$

其中 $\alpha = \left[\frac{2m_w^*}{\hbar^2} E_0\right]^{1/2}$, $\beta = \left\{\frac{2m_b^*}{\hbar^2} [V_0 - E_0]\right\}^{1/2}$. 根据 $f(z)$ 的连续性和边界条件可以得到关于粒子基态能量 E_0 满足的超越方程

$$2\cos(\alpha L_w) + \left(\eta - \frac{1}{\eta}\right) \sin(\alpha L_w) - \left(\eta + \frac{1}{\eta}\right) \sin(\alpha L_w) \times \exp(-\beta L_b) = 0, \quad (4)$$

其中 $\eta = m_w^* \beta / m_b^* \alpha$, 由此可以数值求解 E_0 .

对称双量子阱中激子体系哈密顿的柱坐标表示式为

$$H_X = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{h//}^*} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_e(z_e) + V_h(z_h), \quad (5)$$

其中 m_e^* 是导带电子的有效质量, $m_{h//}^*$ 是空穴沿 z 方向的有效质量, μ 是垂直于 z 轴平面的激子约化质量, $\mu = m_e^* m_{h\perp}^* / (m_e^* + m_{h\perp}^*)$, $m_{h\perp}^*$ 是空穴在垂直于 z 方向的有效质量, ϵ 是介电常数, \mathbf{r}_e 和 \mathbf{r}_h 分别是电子和空穴的坐标. 我们选取基态尝试波函数为^[7]

$$\Psi = N f_e(z_e) f_h(z_h) g(\rho, z, \phi), \quad (6)$$

其中 N 为归一化系数,

$$g(\rho, z, \phi) = \exp(-\lambda \sqrt{\rho^2 + z^2}) \quad (7)$$

是类氢波函数, ρ, z 是电子和空穴的相对坐标, $\rho = \rho_e - \rho_h$, $z = z_e - z_h$, λ 为变分参数, 则对称双量子阱中激子体系的能量为

$$E_X = \frac{\int \Psi^* H_X \Psi d\tau}{\int |\Psi|^2 d\tau}, \quad (8)$$

其中 $d\tau = \rho d\rho dz_e dz_h$ 是总体积元. 由(4)式可以求解电子及空穴的基态能量 E_e 和 E_h , 体系基态能的最小值 $E_{X\min}$ 可由(8)式变分求得, 则体系的束缚能

为

$$E_B = E_e + E_h - E_{X\min}. \quad (9)$$

本文只对重空穴激子进行了计算, 为了简化计算我们没有考虑由于材料的不匹配带来的像势影响, 并且在计算中取 Al 的掺杂浓度 $x = 0.3$, 其他物理参数选取如下^[16]: 在 GaAs 中, $m_c^* = 0.067m_0$, $m_{h\perp}^* = 0.1m_0$, $m_{h//}^* = 0.45m_0$, 在 $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 中, $m_e^* = 0.092m_0$, $m_{h\perp}^* = 0.128m_0$, $m_{h//}^* = 0.51m_0$. 介电常数取 GaAs 中的 12.5, $V_c = 0.3228 \text{ eV}$, $V_h = 0.057 \text{ eV}$.

3. 结果与讨论

我们首先计算了垒宽分别为 10\AA , 20\AA , 50\AA 和 200\AA 的对称 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 双量子阱中激子体系束缚能随阱宽的变化, 并和 Priester 等人^[16] 计算的 $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ 单量子阱中激子体系的束缚能进行比较, 如图 1 所示. 实线为本文结果, 虚线是文献^[16] 的结果. 从图中可以看出, 双量子阱中激子的束缚能要明显小于单量子阱中的束缚能, 这是由于在双量子阱中阱间存在耦合作用的结果. 双量子阱中激子的束缚能随阱宽的变化同单阱具有相同的趋势, 都有极大值出现, 但在双量子阱中极大值出现在 10\AA 左右, 小于单阱中的 20\AA . 极大值的出现是由于体系波函数向垒中渗透产生的. 在单量子阱中, 阱宽较宽时, 由于电子和空穴的库仑作用, 体系波函数分布主要集中在阱中, 库仑势作用是主要因素, 随着阱宽逐渐变小并到达一定值时, 量子限制势和库仑势对体系的作用达到最佳状态, 体系的束缚能出现最大值, 阱宽继续变小, 体系波函数向垒中的渗透逐渐增多, 束缚能减小. 与单量子阱相比, 双量子阱中的体系波函数可以穿透中间势垒层而分布于两个阱中, 此时两阱间有较强的耦合, 对于不同的垒宽, 两阱耦合最强时的阱宽也不同, 束缚能峰值的位置也有少许变化, 对于垒宽不太大的情况, 双量子阱中体

系束缚能的极大值出现在 10Å 左右. 同时我们还计算了垒宽为 1000Å 的极限情况下体系的束缚能, 此时两阱之间基本上不再有耦合, 这时已经同单阱相类似. 我们的结果在阱宽较大时和 Priester 等人^[16] 计算的结果还是比较符合的. 在窄阱时差别较大, 这是由于模型的选取造成的. Priester 等人^[16] 采用的是等效势模型, 而在阱宽很窄以及阱宽很宽时等效势模型已不再适用^[17].

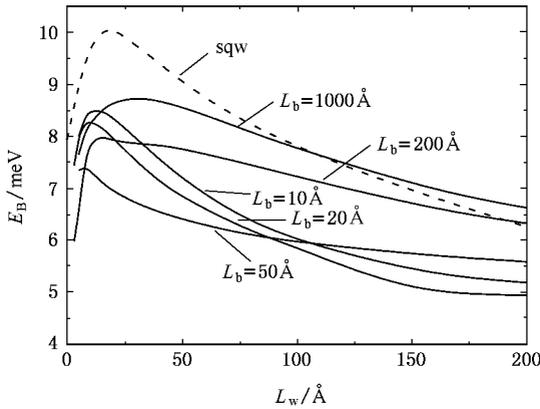


图 1 对称双量子阱中激子体系束缚能随阱宽的变化(实线为本文的计算结果, 虚线是文献^[16]中单量子阱的结果)

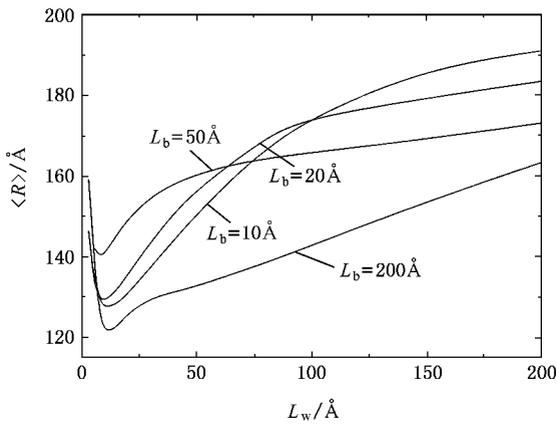


图 2 对称双量子阱中电子和空穴的平均距离随阱宽的变化

图 2 给出的是与图 1 相对应的体系中电子和空穴间的平均距离随阱宽的变化. 可以看出平均距离随阱宽的变化趋势与束缚能随阱宽的变化趋势正好相反, 这是显然的, 束缚能越大粒子间的平均距离越小.

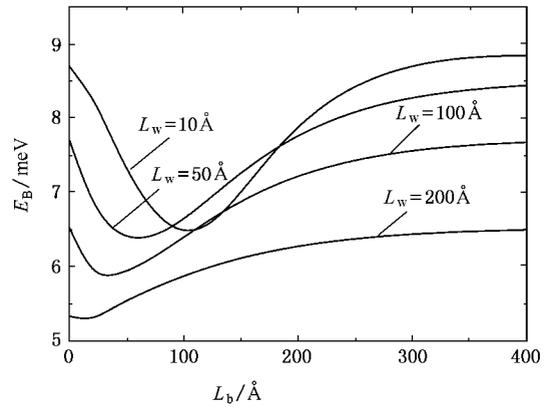


图 3 对称双量子阱中激子体系束缚能随垒宽的变化

图 3 是我们计算的阱宽为 10Å, 50Å, 100Å 和 200Å 的对称 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 双量子阱中激子体系束缚能随垒宽的变化情况. 当阱宽一定时, 体系束缚能随着垒宽的增大先减小后增大, 且随垒宽不断增大而越来越趋近单阱的情况. 这种现象的产生与波函数的渗透有关. 垒宽为 0 的极限情况, 相当于 $2L_w$ 宽的单阱, 随垒宽的增大, 体系波函数向垒中渗透且波函数分布范围增大, 束缚能减小, 而随着垒宽的不断增大波函数穿透势垒层的概率减小, 两阱间的耦合变小, 束缚能相应增加, 并且越来越趋近单阱的情况. 从图中可以看出在垒宽为 400Å 时两阱的耦合作用对束缚能的影响已经很小了, 阱宽为 100Å 时体系束缚能为 7.68 meV 与单阱中的 7.72 meV 已十分接近.

4. 结 论

我们采用变分的方法计算了对称 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 双量子阱中激子体系的束缚能随阱宽、垒宽的变化情况, 并同单阱的情况进行了比较. 从计算的结果可以看出双量子阱中激子体系束缚能受到阱宽和垒宽两种因素的影响, 同单阱相比要复杂得多. 在垒宽一定时, 束缚能先随阱宽的减小而增大, 直到出现一个峰值, 而后随阱宽的减小而减小, 这是库仑势和量子约束势共同作用的结果. 在阱宽一定的条件下, 束缚能随垒宽的增大先减小后增大, 这同体系波函数的渗透有关.

- [1] Yuan X Z , Lu W , Li N , Chen X S , Shen X C , Zi J 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 503 (in Chinese) [袁先漳、陆 卫、李 宁、陈效双、沈学础、资 剑 2003 物理学报 **52** 503]
- [2] Xu G Z , Liang H , Bai Y Q , Lau K M , Zhu X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5344 (in Chinese) [徐耿钊、梁 琥、白勇强、刘纪美、朱 星 2005 物理学报 **54** 5344]
- [3] Levy M , Beserman R , Kapon R , Sa 'ar A , Thierry-Mieg V , Paniel R 2001 *Phys. Rev. B* **63** 075312-1
- [4] Lo I , Tsai J K , Ho P C , Yao W J , Chang C H , Chiang J C , Tu L W , Zhao Q X 2003 *Phys. Rev. B* **67** 195317-1
- [5] Laikhtman B , Shvartman L D 2005 *Phys. Rev. B* **72** 245333-1
- [6] Pan S H , Huang H , Zhang C Z 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 1322 (in Chinese) [潘士宏、黄 晖、张存洲 1992 物理学报 **41** 1322]
- [7] Liu J J , Kong X J 1997 *Phys. Rev. B* **55** 1349
- [8] Liu J J , Chen X F , Li S S 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 2259
- [9] Semger R T , Bajaj K K 2003 *Phys. Rev. B* **64** 205314-1
- [10] Riva C , Peeter F M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 13873
- [11] Filinov A V , Riva C , Peeters F M , Lozovik Y E , Bonitz M 2004 *Phys. Rev. B* **70** 035323-1
- [12] Hui P 2000 *Chin. Phys.* **9** 844
- [13] Zhang H , Shi J J 2004 *Chin. Phys.* **13** 2136
- [14] Shi J J 2002 *Chin. Phys.* **11** 1286
- [15] Debbar N , Hong S , Singh J , Bhattacharya P , Sahai R 1988 *J. Appl. Phys.* **65** 383
- [16] Priester C , Allan G , Lannoo M 1984 *Phys. Rev. B* **30** 7302
- [17] Whittaker D M , Elliott R J 1988 *Solid State Commun.* **68** 1

Binding energies of excitons in symmetrical GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As double quantum wells^{*}

Zhang Hong Liu Lei Liu Jian-Jun[†]

(College of Physical Science and Information Engineering , Hebei Normal University , Shijiazhuang 050016 , China)

(Received 1 June 2006 ; revised manuscript received 19 June 2006)

Abstract

The binding energies of excitons in symmetrical GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As double quantum wells are calculated variationally by using a simple wave function within the effective-mass approximation. The variation of the binding energies as functions of the well and barrier width is studied. It is found that , the changing tendency of the binding energies with the well width is similar to that of the single quantum well. However , we found that the maximum value of the binding energy occurs at well size of about 10Å. The well size is smaller than that in single quantum wells. The binding energies have a minimum during the increase of the barrier width , which is related to the penetration into the barrier of the wave function.

Keywords : symmetrical double quantum wells , excitons , binding energies

PACC : 7135 , 7320D , 7115P

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10574036) , and by the Science and Technology Innovation Foundation of Hebei Province (Grant No. 06547006D-4) .

[†] E-mail : liujj@mail.hebtu.edu.cn