

# 半导体量子阱中激子波函数及其 Fourier 系数的计算和应用\*

雷小丽<sup>1)2)</sup> 王大威<sup>1)†</sup> 梁士雄<sup>1)</sup> 吴朝新<sup>1)‡</sup>

1) (西安交通大学电子信息与工程学院陕西省信息与光子技术重点实验室, 物理电子与器件教育部重点实验室, 西安 710049)

2) (西安邮电学院理学院, 西安 710061)

(2011年8月2日收到; 2011年10月11日收到修改稿)

利用准玻色子方法发展的激子动力学方程是研究半导体纳米结构中激子超快动力学的有效理论手段. 为了将这种方法应用于半导体量子阱, 需要知道量子阱中的激子波函数及其在动量空间的表示, 从而得到激子动力学方程中所必须的系数. 详细讨论了理想和实际量子阱中的激子波函数, 特别是其在动量空间的表示, 并进一步讨论了激子动力学方程中所必须系数的计算方法. 通过求解这些系数, 对量子阱中因激子密度变化而引起的太赫兹脉冲作用下激子能级间跃迁过程中的非线性效应进行了理论预测, 得到了与实验符合很好的结果.

**关键词:** 量子阱, 激子波函数, 激子系数

**PACS:** 78.67.De, 71.35.Cc, 71.35.Lk

## 1 引言

半导体量子阱是由不同成分的半导体材料形成的异质结结构, 是一类重要的半导体纳米结构, 在基础研究和器件中得到了广泛的应用. 这一类半导体器件具有高电子迁移率、高功率增益、高效率、低功耗以及抗电磁辐射能力强等特点. 随着理论研究和制备工艺的不断进步, 半导体量子阱器件在雷达、通信、航空航天、核工业、军用电子等领域的应用越来越广泛, 例如量子 Hall 效应的发现<sup>[1]</sup>就是其应用的一个重要例证. 随着对太赫兹辐射的深入研究, 半导体量子阱在级联激光器中的作用也得到重视<sup>[2,3]</sup>.

由于半导体量子阱可以通过光激发或电激发形成激子, 因此对半导体量子阱中激子动力学的理论<sup>[4-7]</sup>和实验研究<sup>[8]</sup>非常必要. 其中利用超快光学方法对半导体量子阱中激子的动力学已经进行了许多实验研究, 例如当量子阱在太赫兹场作用下, 由于太赫兹场和量子阱子带间的耦合会产生很多物理现象, 如交流 Stark 效应, 佛伦兹 - 凯尔迪什效

应等<sup>[9]</sup>. 太赫兹场作用于多量子阱的光吸收实验也引起了人们广泛的兴趣<sup>[10-12]</sup>, 实验结果表明, 当量子阱受太赫兹场作用后, 会在吸收边上出现红移. 近年来人们将半导体量子阱与光学微腔相结合, 对光子与激子的强相互作用形成的激子 - 极化子的研究也在广泛开展<sup>[13,14]</sup>.

在对光激励半导体中超快现象进行的理论研究<sup>[15-17]</sup>中, 一个常用的方法是以电子和空穴态为基础建立一组包含外来光场的方程——著名的半导体 Bloch 方程 (semiconductor Bloch equations). 这一方法的优势在于它的通用性, 绝大多数相关实验都可以用半导体 Bloch 方程来进行研究, 但伴随这一通用性的缺点是使用的量子态太多, 导致数值计算相当复杂, 并且难以分析相关实验的物理本质. 为了避免以上缺点, 很多研究者从不同角度提出包括激子玻色化 (bosonization)<sup>[18]</sup>, 对易算符技巧 (commutation-technique)<sup>[19]</sup>, 以及准玻色子 (quasi-Boson) 方法<sup>[17]</sup>.

在本文中, 我们将介绍激子的准玻色子方法, 给出适用于一般半导体纳米结构的关于激子算符

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10904122) 资助的课题.

† E-mail: dawei.wang@mail.xjtu.edu.cn

‡ E-mail: zhaoxinwu@mail.xjtu.edu.cn

的动力学方程. 方程中出现的一系列系数不但是数值求解激子动力学方程所必需的, 同时也是理解激子密度对各种物理量 (如激子能级随激子密度的变化) 的关键. 为了获得这些系数, 需要得到半导体纳米结构中激子的波函数及其在动量空间的表示. 因此我们以半导体量子阱为例, 给出求解理想和真实量子阱中激子波函数 Fourier 变换系数的具体步骤. 近年来, 随着太赫兹脉冲技术的进步 [20], 有很多相关实验对半导体纳米结构中激子跃迁进行了研究. 由于这一跃迁过程在很大程度上受多体相互作用的影响 [21–24], 所以这一方面的理论研究还不多见, 而且关于如何处理激子的准玻色性 (激子是由费米子形成的复合粒子) 还有很多争议 [25]. 本文利用我们发展的准玻色子方法, 将给出研究多体作用对激子能级之间跃迁影响的一种方法, 总结使用这一方法的大致步骤, 并最终对太赫兹作用下, 阱宽为 14 nm, 间距为 10 nm 的 GaAs 量子阱结构中激子从 1s 到 2p 态的跃迁进行理论研究 [24], 探讨这一跃迁过程中受激子密度影响下的非线性效应.

## 2 激子动力学方程及其系数

在准玻色子方法中 [17], 我们使用一组关于激子算符  $B_{\mu}^{\dagger}$  的动力学方程来研究半导体纳米结构中载流子的动力学过程. 在这种方法中我们首先利用 Usui 变换 [26] 定义准玻色子的产生算符 [17]:

$$B_{\mathbf{k}}^{\dagger} = OU(\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}\beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger})U^{\dagger}O^{\dagger}, \quad (1)$$

这里  $B_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  是系统中电子空穴对的产生算符,  $\alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger})$  是电子 (空穴) 的产生算符,  $\mathbf{k}$  是电子空穴对中电子的动量. Usui 变换  $U$  和排序算符  $O$  对于从 Fermi 算符到准玻色子算符  $B_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  的映射是必要的. 通过一个正则变换, 可以从  $B_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  得到激子的产生算符:

$$B_{\mu}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mu}^{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \quad (2)$$

这里  $\mu$  代表激子的内部能级, 例如对于量子阱中的激子可以有 1s, 2s, 2p 态等,  $c_{\mu}^{\mathbf{k}}$  为展开系数, 它的值可以从激子的波函数得到 (下面我们会给出更详细的解释). 因为  $B_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  含有电子和空穴, 因而不是纯玻色子算符, 它有着比较特殊的对易关系 [17]:

$$[B_{\mathbf{k}}, B_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(1 - 2B_{\mathbf{k}}^{\dagger}B_{\mathbf{k}}), \quad (3)$$

并且还要满足如下的条件,

$$B_{\mathbf{k}}^{\dagger}B_{\mathbf{k}}^{\dagger} = 0. \quad (4)$$

通过上述对易关系 (3) 式, 可以得到算符  $B_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  的动力学方程:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} B_{\mathbf{p}}^{\dagger} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}} [(E_{\mathbf{g}} + V_0 + \epsilon_{\mathbf{p}}^e + \epsilon_{-\mathbf{p}}^h)\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} - V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}] B_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ &+ 2 \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} B_{\mathbf{p}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}} - 2 \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{p}}^{\dagger} B_{\mathbf{p}} \\ &+ \mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{M}_{\text{cv}} - 2\mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{M}_{\text{cv}} B_{\mathbf{p}}^{\dagger} B_{\mathbf{p}}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中  $E_{\mathbf{g}}$  为导带和价带的带隙,  $\epsilon_{\mathbf{p}}^e(\epsilon_{-\mathbf{p}}^h)$  为电子 (空穴) 的动能,  $V_{\mathbf{q}}$  为动量空间的势能,  $\mathbf{M}_{\text{cv}}$  为带间跃迁偶极距,  $\mathcal{E}(t)$  是激发激子所用的光脉冲. 这一方程和常用半导体 Bloch 方程之间的联系在文献 [17] 中讨论过. 利用动力学方程 (5) 和正则变换 (2), 可得到关于激子算符  $B_{\mu}^{\dagger}$  的动力学方程.

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} \langle B_{\mu}^{\dagger} \rangle + E_{\mu} \langle B_{\mu}^{\dagger} \rangle \\ &= -i\hbar \frac{\langle B_{\mu}^{\dagger} \rangle}{T_{\text{inter}}^{\text{EXE}}} + 2 \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3} R_{\mu_1, \mu_2, \mu_3}^{\mu} \langle B_{\mu_1}^{\dagger} \rangle \langle B_{\mu_2}^{\dagger} B_{\mu_3} \rangle \\ &+ \mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{M}_{\text{cv}}^* \left( C_{\mu} - 2 \sum_{\mu_1, \mu_2} C_{\mu, \mu_1, \mu_2} \langle B_{\mu_1}^{\dagger} B_{\mu_2} \rangle \right), \end{aligned} \quad (6)$$

式中

$$R_{\mu_1, \mu_2, \mu_3}^{\mu} = R1_{\mu_1, \mu_2, \mu_3}^{\mu} - R2_{\mu_1, \mu_2, \mu_3}^{\mu}, \quad (7)$$

$$R1_{\mu_1, \mu_2, \mu_3}^{\mu} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} c_{\mu}^{\mathbf{p}} c_{\mu_1}^{\mathbf{p}*} c_{\mu_2}^{\mathbf{k}*} c_{\mu_3}^{\mathbf{k}}, \quad (8)$$

$$R2_{\mu_1, \mu_2, \mu_3}^{\mu} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} c_{\mu}^{\mathbf{p}} c_{\mu_2}^{\mathbf{p}*} c_{\mu_1}^{\mathbf{k}*} c_{\mu_3}^{\mathbf{p}}, \quad (9)$$

$$C_{\mu} = \sum_{\mathbf{p}} c_{\mu}^{\mathbf{p}}, \quad (10)$$

$$C_{\mu, \mu_1, \mu_2} = \sum_{\mathbf{p}} c_{\mu}^{\mathbf{p}} c_{\mu_1}^{\mathbf{p}*} c_{\mu_2}^{\mathbf{p}}. \quad (11)$$

在等式 (6) 中,  $E_{\mu}$  是处于  $\mu$  态激子的能量,  $T_{\text{inter}}^{\text{EXE}}$  是  $\langle B_{\mu}^{\dagger} \rangle$  的消相干时间. (7)–(11) 式中的系数不但是数值求解激子动力学方程所必需的, 它们也使得我们可以很容易地估计激子能级随密度可能的变化 [27]. 为了得到这些系数, 首先需要知道系统中激子的波函数, 再通过 Fourier 变换求出  $c_{\mu}^{\mathbf{p}}$ . 在下文中将给出解析或数值求解 (7)–(11) 式中系数的方法.

## 3 量子阱中激子波函数的计算

在利用激子动力学方程研究光激发的半导体纳米结构之前, 需要得到一个特定纳米结构的激子

系数 [(7)—(11) 式], 对于激子系数的计算则要求得到这一纳米结构中的激子波函数. 在本节中将首先简要讨论理想和实际量子阱中波函数是如何获得的, 并给出理想量子阱中激子波函数的解析结果. 利用获得的激子的波函数, 将计算波函数在动量空间的表示, 从而进一步计算激子系数.

### 3.1 理想量子阱中激子波函数的计算

理想的量子阱可以看成厚度趋于零的一个无限大平面, 激子只能在平面内运动. 量子阱波函数的求解是一个典型的量子力学的本征值问题, 但是激子在此系统中的波函数的解析形式比较复杂, 文献 [15,28] 中给出的结果也不相符, 因而这里将给出较为具体的结果.

理想量子阱中激子的 Hamilton 量为

$$H = \frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m^*} + V(r), \quad (12)$$

这里  $m^*$  是激子的约化质量,  $1/m^* = 1/m_c + 1/m_v$ ,  $\mathbf{r} = (x, y)$ ,  $r = |\mathbf{r}|$ ,  $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon r$  为电子和空穴在国际标准单位 (SI) 下的 Coulomb 作用力,  $e$  为电子的电量,  $\epsilon$  为介电常数. 对于二维系统其能量的本征函数可通过下式精确求解:

$$\left( -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right) \psi(r) = E\psi(r). \quad (13)$$

对于 (13) 式, 可以引入三维系统 1s 激子的 Bohr 半径  $a_0$  和能量单位 Rydberg

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{m^*e^2}, \quad (14)$$

$$R_y = \frac{e^2}{8\pi\epsilon a_0} = \frac{\hbar^2}{2m^*a_0^2}. \quad (15)$$

对方程 (13) 中的半径  $r$  和角度  $\phi$  进行变量分离并解出方程, 可以得到激子的束缚态能级为

$$E_n = -\frac{1}{(n+1/2)^2} R_y, \quad (16)$$

并且得到归一化后的波函数为

$$\psi_{n,m}(r) = \frac{1}{a_0(n+1/2)} \sqrt{\frac{1}{\pi(n+1/2)} \frac{(n-|m|!)}{(n+|m|!)}} \rho^{|m|} \times \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L_{n-|m|}^{2|m|}(\rho) \exp(im\phi), \quad (17)$$

其中  $L_n^m$  为联合 Laguerre 多项式,  $n, m$  分别为半径和角动量方向上的量子数,  $\rho = 2r/(n+1/2)a_0$ . 我们注意到此结果和文献 [28] 一致 (但与文献 [15] 不同). 从 (16), (17) 式得到 1s 态的激子其束缚能量和半径分别为  $E_b = 4R_y$ ,  $a_0^* = a_0/2$ , 可以看出二维激

子的束缚能量和半径分别为三维激子的四倍和二分之一.

为了简化公式, 对  $\mu = (n, m)$  态的激子, 可以引入新的单位长度

$$\lambda_{n,m} = \frac{n+1/2}{2} a_0, \quad (18)$$

则激子的波函数可表示为

$$\psi_{n,m}(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi(n+1/2)} \frac{(n-|m|!)}{(n+|m|!)}} \rho^{|m|} \times \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L_{n-|m|}^{2|m|}(\rho) \times \exp(im\phi). \quad (19)$$

我们可以引入与此相对应的另一个单位

$$\xi_n = \frac{1}{\lambda_n} = \frac{2}{(n+1/2)a_0}, \quad (20)$$

这一单位将用于简化下述波函数在动量空间的表示.

### 3.2 实际量子阱波函数

不同于理想的量子阱, 对于实际量子阱不仅需要考激子波函数在平面 ( $x$ - $y$  平面) 内的运动, 还需要考虑激子在  $z$  方向的波函数. 因此实际量子阱中的波函数可表示为 [29]

$$\Phi_{n,m}(r, \phi, z_e, z_h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f_e(z_e) f_h(z_h) \times \exp(im\phi) \sum_{k_{i,m}} A_{k_{i,m}}^{n,m} g_{k_{i,m}}^m(r), \quad (21)$$

式中  $A = \pi R^2$  是用于波函数归一化的面积, 为电子 (空穴) 在平面内的波矢,  $r$  为平面内空穴和电子之间的距离,  $f_e(z_e)$  和  $f_h(z_h)$  为电子与空穴在  $z$  方向上的波函数. 可以看到上式是利用  $g_{k_{i,m}}^m(r)$  作为基矢函数进行的展开, 而  $A_{k_{i,m}}^{n,m}$  是展开系数.  $g_{k_{i,m}}^m(r)$  是归一化的  $m$  阶 Bessel 函数,

$$g_{k_{i,m}}^m(r) \equiv N_{k_{i,m}}^m J_m(k_{i,m}r), \quad (22)$$

其中  $N_{k_{i,m}}^m = \sqrt{2}/R |J'_m(k_{i,m}R)|$  是归一化系数, 而  $k_{i,m}$  是  $m$  阶 Bessel 函数的第  $i$  个零点 (也就是  $J_m(k_{i,m}R) = 0$ ). (21) 式中的展开系数可以通过数值方法求解量子阱中关于激子的 Schrödinger 方程得到 [30].

### 4 激子波函数在动量空间的表示

为了将准玻色子算符  $B_{\mathbf{k}}^\dagger$  变换为激子算符  $B_\mu^\dagger$  [见 (2) 式], 可以利用如下的变换关系得到

系数  $c_\mu^k$ ,

$$\begin{aligned} \psi_\mu(\rho, \phi, z) &= \langle \mathbf{r} | B_\mu^\dagger | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}} c_\mu^k \langle \mathbf{r} | B_\mu^\dagger | 0 \rangle \\ &= f_e(z) f_h(z) \sum_{\mathbf{k}} c_\mu^k \varphi_{\mathbf{k}}(\rho), \end{aligned} \quad (23)$$

式中  $z$  是垂直于量子阱平面的方向, 而  $\rho$  是  $x$ - $y$  平面内位置的坐标,  $f_{e,h}(z)$  是由构成量子阱的材料以及阱的宽度所决定的, 对于理想的量子阱, 可以简单地取  $f_{e,h}(z) = 1$ . 对于准玻色子的波函数  $\varphi_{\mathbf{k}}(\rho)$ , 可以使用平面波  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \rho)$  进行表示, 因此可以看到  $c_\mu^k$  的计算中关键的一步是对激子波函数  $\psi_\mu(\rho, \phi, z)$  进行 Fourier 变换.

### 4.1 理想量子阱的 $c_\mu(\mathbf{p})$

为了简化公式, 约定  $\psi_{n,m}(\mathbf{r})$  中使用的长度单位为  $\lambda_n$ , 相应的  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  使用  $\xi_n$  作为单位. 对于理想的量子阱, 可以利用 (19) 和 (23) 式得到:

$$\begin{aligned} c_{n,m}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2\pi} B_{n,m} \int_0^\infty \rho d\rho \rho^{|m|} \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) \\ &\quad \times L_{n-|m|}^{2|m|}(\rho) \int_0^{2\pi} d\phi \\ &\quad \times \exp[im\phi - i\rho p \cos(\phi - \varphi)], \end{aligned} \quad (24)$$

此处使用了极坐标 [ $\mathbf{p} = p(\cos\varphi, \sin\varphi)$ ,  $\mathbf{r} = r(\cos\phi, \sin\phi)$ ], 并且

$$B_{n,m} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi(n+1/2)} \frac{(n-|m|!)}{(n+|m|!)}}. \quad (25)$$

利用对  $\phi$  的积分

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} d\phi \exp[im\phi - i\rho p \cos(\phi - \varphi)] \\ &= 2\pi(-i)^m J_m(\rho p) \exp(im\varphi), \end{aligned} \quad (26)$$

可以得到

$$\begin{aligned} c_{n,m}(\mathbf{p}) &= B_{n,m} \exp(im\varphi) (-i)^m \int_0^\infty d\rho \rho^{|m|+1} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) L_{n-|m|}^{2|m|}(\rho) d\phi J_m(\rho p), \end{aligned} \quad (27)$$

式中  $L_{n-|m|}^{2|m|}$  为 Laguerre 多项式. 为了求出 (27) 式中的积分, 可以利用 Laguerre 多项式的两种表示形式. 在第一种表达形式中

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{m=0}^n \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{(-x)^m}{m!}, \quad (28)$$

从而我们可以得到  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  的一种解析表达方式

$$c_{n,m}(\mathbf{p})$$

$$\begin{aligned} &= B_{n,m} \exp(im\varphi) i^m (-p)^m \\ &\quad \times \left[ L_{n-|m|}^{2|m|} \left( -\frac{\partial}{\partial\alpha} \right) \right] \left( -\frac{\partial}{\partial\alpha} \right)^{|m|+1} \\ &\quad \times \left[ (p^2 + \alpha^2)^{-\frac{1}{2}} \left( \sqrt{(p^2 + \alpha^2) + \alpha} \right)^{-m} \right], \end{aligned} \quad (29)$$

其中  $L_{n-|m|}^{2|m|}(-\partial/\partial\alpha)$  表示将 Laguerre 多项式 [(28) 式] 中的  $x$  替换为  $-\partial/\partial\alpha$ . 第二种方法使用了如下的一个积分来表示 Laguerre 多项式 [28]:

$$\begin{aligned} &L_{n-|m|}^{2|m|}(\rho) \\ &= (-1)^n \frac{(n+1/2)}{\rho^{|m|}} \exp\left(\frac{1}{2}\rho\right) \int_0^\infty P_n^{|m|} \left( \frac{1-y}{1+y} \right) \\ &\quad \times \frac{J_m\left(\frac{\rho}{2}\sqrt{y}\right)}{(1+y)^{3/2}} dy, \end{aligned} \quad (30)$$

其中  $P_n^{|m|}(x)$  是联合 Legendre 多项式, 从而可以得到  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  的另外一种形式:

$$\begin{aligned} c_{n,m}(\mathbf{p}) &= \frac{n+1/2}{2} a_0 \sqrt{\frac{1}{\pi(n+1/2)} \frac{(n-|m|!)}{(n+|m|!)}} \\ &\quad \times (-i)^m (-1)^n \exp(im\varphi) \\ &\quad \times \frac{4(n+1/2)}{\left\{ 1 + [(n+1/2)a_0 p]^2 \right\}^{\frac{3}{2}}} \\ &\quad \times P_n^{|m|} \left\{ \frac{1 - [(n+1/2)a_0 p]^2}{1 + [(n+1/2)a_0 p]^2} \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

利用 (29) 和 (31) 式分别计算  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  可以得到相同的结果, 表 1 列出了当  $n = 0, 1, 2$  时  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  的表达式.

表 1 当  $n = 0, 1, 2$  时  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  的表达式

$n$	$m$	$c_{n,m}(\mathbf{p})$
0	0	$4(4p^2 + 1)^{-3/2}$
1	0	$12(4p^2 - 1)(4p^2 + 1)^{-5/2}$
	1	$-48p(4p^2 + 1)^{-5/2}$
2	0	$20(16p^4 - 16p^2 + 1)(4p^2 + 1)^{-7/2}$
	1	$-240p(4p^2 - 1)(4p^2 + 1)^{-7/2}$
	2	$960p^2(4p^2 + 1)^{-7/2}$

### 4.2 实际量子阱的 $c_\mu(\mathbf{p})$

为了确定实际量子阱中的  $c_\mu(\mathbf{p})$ , 需要知道形成量子阱的具体材料, 因为不同的材料会形成不同的束缚态激子波函数. 在计算束缚态激子波函数时, 我们使用了文献 [30] 中的方法. 这里假设激子的波函数已经得到 (在 5.2 一节中, 将会给出具体的波函数), 而量子阱平面内的波函数在半径  $R = 40r_B$  的

圆形面积内进行归一化, 其中  $r_B$  为 1s 激子的 Bohr 半径. 实际量子阱中的波函数  $\psi_{n,m}(r, \phi, z_e, z_h)$  与其在动量空间中的表示  $c_{\mu}(\mathbf{p})$  的关系可以从下式得到:

$$\begin{aligned} & \psi_{n,m}(r, \phi, z_e, z_h) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f_e(z_e) f_h(z_h) \exp(im\phi) \sum_{k_{i,m}} A_{k_{i,m}}^{n,m} g_{k_{i,m}}^m(r) \\ &= f_e(z_e) f_h(z_h) \sum_p c_{\mu}^p \frac{\exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}{L}, \end{aligned} \quad (32)$$

其中  $L = 2R$ ,  $k_{i,m}$  满足  $J_m(k_{i,m}R) = 0$ , 系数  $A_{k_{i,m}}^{n,m}$  是在计算  $\psi_{n,m}$  的过程中得到的. 通过多步化简, 可以得到:

$$\begin{aligned} & c_{n,m}(\mathbf{p}) \\ &= \frac{\sqrt{2\pi}}{L} \exp\left[im\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)\right] J_m(pR) \\ & \quad \times \sum_{k_{i,m}} A_{k_{i,m}}^{n,m} \frac{k_{i,m} \operatorname{sgn}[J'_m(k_{i,m}R)]}{k_{i,m}^2 - p^2}, \end{aligned} \quad (33)$$

其中函数  $\operatorname{sgn}(x)$  是符号函数 (判断  $x$  的正负号). 在已知  $A_{k_{i,m}}^{n,m}$  的情况下, 可以通过数值计算得到  $c_{n,m}(\mathbf{p})$ .

## 5 激子系数的计算和应用

### 5.1 激子系数的计算

得到量子阱中束缚态激子的  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  后, 就可以利用 (7)—(11) 式来计算激子动力学方程 (6) 中所需的激子动力学系数. 对于理想量子阱的情况, 可以将 (7)—(11) 式转化为极坐标下的积分, 并使用  $c_{n,m}(\mathbf{p})$  的解析公式 [(31) 式及表格] 进行计算. 对于关于 1s 激子的一些系数, 还可以得到一些解析的结果 [31]. 对于实际的量子阱, 可以利用类似的方法, 用 (33) 式进行计算. 但值得注意的是, (33) 式的计算比较耗时, 不适合在复杂的积分程序中使用. 一种可行的办法是在选定的关于  $\mathbf{p}$  的一组值上  $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$  预先求得  $c_{n,m}(p_i)$ , 然后利用较为简单的积分程序 (例如梯形法) 进行积分, 我们在实践当中发现这种方法可以显著地提高积分效率. 具体来说, 假设  $I$  是对一个变量  $p$  的积分, 可写成下式

$$I = \int_0^{\infty} p dp g(p), \quad (34)$$

如果我们知道  $g(p)$  在一组  $p$  上的取值, 则上式可以

写为

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} [(p_N - p_{N-1})g(p_N) + p_2g(p_1)] \\ & \quad + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{N-1} (p_{i+1} - p_{i-1})g(p_i) \\ & \equiv \oint k dk f(k). \end{aligned} \quad (35)$$

(35) 式中, 用  $\oint k dk f(k)$  来表示对于  $I$  的积分所使用的数值方法. 利用这一记号,  $C_{\mu}$  可以表达为

$$C_{\mu} = \delta_{m,0} \frac{L^2}{2\pi} \oint k dk c_{\mu}^k, \quad (36)$$

其中  $\mu = (n, m)$  是激子所处的量子态, 而  $\delta_{m,0}$  表示只有对于角动量为 0 的激子态,  $C_{\mu}$  才不为 0. 对于其他的激子系数, 可以得到类似的表达式, 这里不再一一列出 [32].

### 5.2 量子阱中由多体作用引起的非线性效应

半导体材料中的光学现象得到过广泛的研究, 例如, 较早的文献[4]探讨了半导体吸收边附近的三阶非线性光学常数. 利用本文中的方法, 可以得到激子方程中的系数, 从而对量子阱中由多体作用引起的非线性效应进行直截了当的预测. 假设系统中主要是由 1s 激子组成 (由共振激发产生的系统), 对 (6) 式做简单的变形, 可以得到:

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{d}{dt} \langle B_{\mu}^{\dagger} \rangle + \left( E_{\mu} - 2R_{\mu,1s,1s}^{\mu} \langle B_{1s}^{\dagger} B_{1s} \rangle \right) \langle B_{\mu}^{\dagger} \rangle \\ & \simeq + \mathcal{E}(t) \cdot \mathbf{M}_{cv}^* \left( C_{\mu} - 2 \sum_{\mu_1, \mu_2} C_{\mu, \mu_1, \mu_2} \langle B_{\mu_1}^{\dagger} B_{\mu_2} \rangle \right). \end{aligned} \quad (37)$$

从 (37) 式可以清楚地看到, 由于 1s 激子的存在, 处于  $\mu$  态的激子的能级  $E_{\mu}$  发生了变化, 变化的大小由 1s 激子密度和激子系数  $R_{\mu,1s,1s}^{\mu}$  共同决定:

$$\delta E_{\mu} = - 2R_{\mu,1s,1s}^{\mu} \langle B_{1s}^{\dagger} B_{1s} \rangle. \quad (38)$$

需要注意的是在 (38) 式中,  $\langle B_{1s}^{\dagger} B_{1s} \rangle$  是系统内激子的数目.

我们注意到, 近年来实验上使用宽频带的太赫兹脉冲对激子从 1s 到 2p 态的跃迁进行了研究, 发现跃迁的共振频率受激子密度的强烈影响: 当激子密度增大时, 共振频率会发生红移, 并且值得注意的是, 这一红移随激子密度的速度变化大约是 1s 态激子蓝移速度的四倍 [24], 因而不仅需要考虑到 1s 激子能级的变化 [31,33,34], 还必须考虑到 2p 态激子的能级随激子密度的变化. 我们可以利用 (38) 式来

得到  $\delta E_{1s}$  和  $\delta E_{2p}$ , 从而进行理论分析. 对于理想的量子阱关于 1s 能级的系数, 可以得到一些解析的结果 [31], 但对于实际的量子阱或理想量子阱的更高能级, 只有利用本文中的方法, 数值计算  $R_{1s,1s,1s}^{1s}$  和  $R_{2p,1s,1s}^{2p}$ , 从而得到  $\delta E_{1s}$  和  $\delta E_{2p}$ . 具体来说, 需要 1) 计算相应纳米结构中激子的波函数; 2) 得到波函数在动量空间的表示 (参考第 4 节); 3) 计算激子系数 [17]. Huber 等 [24] 的实验中使用了阱宽为 14 nm, 阱间距为 10 nm 的 GaAs 量子阱结构 (量子阱的势垒结构由  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  组成). 对于这一结构, 我们在理论上得到了其中有关 1s 和 2p 态激子的系数  $R_{1s,1s,1s}^{1s}$  和  $R_{2p,1s,1s}^{2p}$ , 从而得到 1s 态激子能量的能移 \*

$$\begin{aligned} \delta E_{1s} &\simeq -2R_{1s,1s,1s}^{1s} \langle B_{1s}^\dagger B_{1s} \rangle \\ &= 12.3 \times 10^{-12} n_{1s} \text{ meV/cm}^2, \end{aligned} \quad (39)$$

而 2p 态激子能量的能移为

$$\begin{aligned} \delta E_{2p} &\simeq -2R_{2p,1s,1s}^{2p} \langle B_{1s}^\dagger B_{1s} \rangle \\ &= -41.1 \times 10^{-12} n_{1s} \text{ meV/cm}^2. \end{aligned} \quad (40)$$

在计算激子波函数的过程中, 我们还得到了 1s 和 2p 激子的束缚能, 分别是  $-9.1 \text{ meV}$  和  $-1.6 \text{ meV}$ .

(39) 和 (40) 式清楚地表明 1s 态激子能量随激子密度增加, 而 2p 态激子能量随之减小. 这一现象说明不同激子态在多体作用下的能移可以出现不同的结果. 利用这两个结果, 现在可以计算激子由 1s 到 2p 态跃迁受激子密度的影响. 图 1 给出了 1s 激子能级, 以及激子能级间 1s 到 2p 的跃迁能量随激子密度的变化. 可以看到这一结果和文献 [24] 中的实验结果在总体上是一致的, 特别是 1s 激子能级随密度的变化符合得很好, 并且可以看到  $\delta E_{1s \rightarrow 2p} / \delta E_{1s} \simeq 4.3$  也和实验结果相符. 有若干因素可能造成理论上预测的 1s 到 2p 跃迁随激

子密度的变化比实验上的快: 1) 在理论上仅考虑了 1s 激子密度的影响, 而没有考虑处于更高能级的激子; 2) 实验中在准确标定激子密度上有一定的难度; 3) 系统中产生的自由电子和空穴的作用 (主要是 Coulomb 屏蔽) 还没有考虑. 这些因素将在今后的工作当中进行更深入的研究.

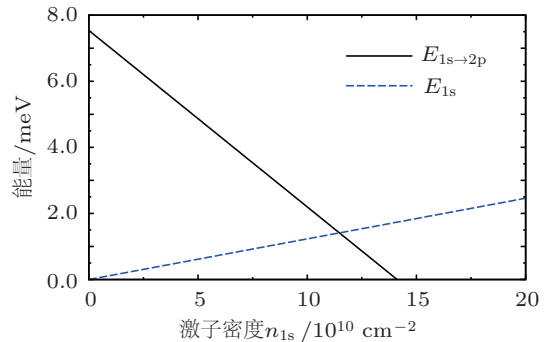


图 1 阱宽为 14 nm, 阱间距为 10 nm 的 GaAs 量子阱结构中 1s 激子能级, 以及激子能级间 1s 到 2p 的跃迁能量随激子密度的变化. 为了方便和文献 [23] 比较, 我们将 1s 激子的能量设为能量零点

## 6 结论

利用激子的准玻色子方法得到了激子的动力学方程, 给出了计算理想和实际量子阱中波函数和 Fourier 变换系数的方法. 进一步给出了利用激子波函数 Fourier 变换系数计算激子动力学方程中出现的系数的方法, 这些系数不但是求解激子动力学方程所必需的, 同时也是理解激子密度对各种物理量的关键. 最后将本文中的方法用到实际量子阱当中, 求出了量子阱中激子能级随激子密度变化的关系, 为研究太赫兹脉冲诱导的激子态之间的跃迁提供了一个较为简单的理论途径.

Marc M. Dignam 教授对我们的研究予以诸多指导, 谨此致谢.

[1] Laughlin R B 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1395  
 [2] Tsekoun A, Go R, Pushkarsky M, Razeghi M, Patel C K N 2006 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **103** 4831  
 [3] Wang D W, Zhang A, Yang L, Dignam M M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 115307  
 [4] Gan Z Z, Yang G Z 1982 *Acta Phys. Sin.* **31** 237 (in Chinese) [甘子钊, 杨国桢 1982 物理学报 **31** 237]  
 [5] Zang 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]  
 [6] Li M, Mi X W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5534  
 [7] Wang D W, Lei X L, Wu Z X 2011 *J. Phys. Condens. Matter* **23** 345801  
 [8] Ji Z W, Lu Y, Chen J X, Mino H, Akimoto R, Takeyama S 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1214 (in Chinese) [冀子武, 鲁云, 陈锦祥, 三野弘文, 秋本良一, 山正二郎 2008 物理学报 **57** 1214]  
 [9] Jauho A, Johnsen K 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 4576

\* 在得到  $\delta E_{1s}$  和  $\delta E_{2p}$  的过程当中, 需要将系统内的激子数  $\langle B_{1s}^\dagger B_{1s} \rangle$  转化为激子密度  $n_{1s}$ , 因为激子的系数计算中设定了系统的半径是  $R = 40a_0$  (对 GaAs,  $a_0 \simeq 15 \text{ nm}$ ), 所以应当有  $\langle B_{1s}^\dagger B_{1s} \rangle = n_{1s} \pi R^2$ . 更多的细节可以在文献 [30] 中找到.

- [10] Černe J, Kono J, Inoshita T, Sherwin M, Sundaram M, Gossard C 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 3543
- [11] Kono J, Su M, Inoshita T, Noda T, Sherwin M, Allen Jr S, Sakaki H 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 1758
- [12] Phillips C, Su M Y, Sherwin M S, Ko J, Coldren L 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 2728
- [13] Amo A, Lefrère J, Pigeon S, Aadrados C, Ciuti C, Carusotto I, Houdr R, Giacobino E, Bramati A 2009 *Nat. Phys.* **5** 805
- [14] Amo A, Sanvitto D, Laussy F P, Ballarini, Valle E D, Martin M D, Lemaître A, Bloch J, Krizhanovskii D N, Skolnick M S, Tejedor C, Vi L A 2009 *Nature* **457** 291
- [15] Haug H, Koch S W 1990 *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (Singapore: World Scientific)
- [16] Mi X W 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 1191
- [17] Wang D W, Hawton M, Dignam M M 2007 *Phys. Rev. B* **76** 115311
- [18] de Leon B S, Laikhtman B 2001 *Phys. Rev. B* **63** 125306
- [19] Betbeder-Matibet O, Combescot M 2002 *Eur. Phys. J. B* **27** 505
- [20] Lloyd-Hughes J, Beere H E, Ritchie D A, Johnston M B 2008 *Phys. Rev. B* **77** 125322
- [21] Johnsen K, Kavoulakis G M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 858
- [22] Kaindl R A, Carnahan M A, Hagele D, Lovenich R, Chemla D S 2003 *Nature* **423** 734
- [23] Cao J C 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 237401
- [24] Huber R, Kaindl R A, Schmid B A, Chemla D S 2005 *Phys. Rev. B* **72** 161314
- [25] Combescot M, Betbeder-Matibet O 2003 *Europhys. Lett.* **62** 140
- [26] Usui T 1960 *Prog. Theor. Phys.* **23** 787
- [27] Utsunomiya S, Tian L, Roumpos G, Lai G W, Kumada N, Fujisawa T, Kuwata-Gonokami M, Yamamoto Y 2008 *Nat. Phys.* **4** 700
- [28] Parfitt D G W, Portnoi M E 2002 *J. Math. Phys.* **43** 4681
- [29] Dignam M M, Sipe J E 1990 *Phys. Rev. B* **41** 2865
- [30] Yang L, Rosam B, Lachaine J M, Leo K, Dignam M M 2004 *Phys. Rev. B* **69** 65310
- [31] Wang D W, Dignam M M 2009 *Phys. Rev. B* **79** 165320
- [32] Wang D W 2008 *Ph. D. Dissertation* (Queen's University at Kingston)
- [33] Peyghambarian N, Gibbs H M, Jewell J L, Antonetti A, Migus A, Hulin D, Mysyrowicz A 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 2433
- [34] Schmitt-Rink S, Chemla D S, Miller D A B 1985 *Phys. Rev. B* **32** 6601

# Wavefunction and Fourier coefficients of excitons in quantum wells: computation and application\*

Lei Xiao-Li<sup>1)2)</sup> Wang Da-Wei<sup>2)†</sup> Liang Shi-Xiong<sup>2)</sup> Wu Zhao-Xin<sup>2)‡</sup>

1) (Shaanxi Key Laboratory of Photonics Technology for Information and Key Laboratory for Physical Electronics and Devices of the Ministry of Education, School of Electronic and Information Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

2) (Xi'an University of Post and Telecommunications, Xi'an 710061, China)

(Received 2 August 2011; revised manuscript received 11 October 2011)

## Abstract

Excitonic dynamic equations, which are derived from the quasi-Boson approach, are useful tools in investigating the ultrafast optical responses of semiconductor nanostructures. To apply these equations to the exciton dynamics in semiconductor quantum wells, we need exciton wavefunctions and their representations in momentum space to obtain the coefficients in the excitonic dynamic equations. By discussing in detail the exciton wavefunctions and their momentum-space representations, we present a method of obtaining the essential coefficients in the excitonic dynamic equations. We finally use these coefficients to understand the nonlinear effects in the terahertz-pulse-induced intraexcitonic transitions caused by high exciton densities. The obtained theoretical results are in good agreement with recent experimental results.

**Keywords:** quantum wells, exciton wavefunction, excitonic coefficient

**PACS:** 78.67.De, 71.35.Cc, 71.35.Lk

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.10904122).

† E-mail: dawei.wang@mail.xjtu.edu.cn

‡ E-mail: zhaoxinwu@mail.xjtu.edu.cn