

准二维强耦合激子能量的温度依赖性*

额尔敦朝鲁[†]

(河北科技师范学院数理系, 秦皇岛 066004)

摘要: 采用线性组合算符法和 LLP 变分法研究了晶格热振动和极化子效应对量子阱中激子与界面光学(LO)声子强耦合又与体纵光学(LO)声子弱、中耦合体系的基态和激发态的影响,推导出作为量子阱宽和温度函数的激子基态能量的移动和第一内部激发态能量的移动的表达式,以 AgCl/AgBr/AgCl 量子阱为例进行了数值计算.结果表明,由激子-IO 声子强耦合所产生的激子基态能量移动和第一内部激发态能量移动随温度的升高而增大,而由激子-LO 声子弱、中耦合所产生的激子基态能量移动和第一内部激发态能量移动随温度的升高而减小.

关键词: 强耦合激子; 能量移动; 极化子效应; 温度依赖性

PACC: 6320K; 7138

中图分类号: O471.4

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2008)07-1318-08

1 引言

随着微纳制造技术的出现和日臻发展,半导体异质结和超晶格已在许多领域得到广泛应用,其应用范围还将不断扩大.量子阱是超晶格的基本组成单元,研究其性质有助于探索超晶格的性质.特别是,半导体量子阱具有大的激子结合能、大的光学非线性和快的非线性响应速度,它在有源和无源光电子器件中都具有广泛的应用^[1,2],因而,近年来,处于量子阱中的激子问题,尤其是激子-声子相互作用的问题备受国内外关注,许多学者作了大量有益的研究工作^[3-9].然而,随着技术的进步,本领域仍有一些值得关注的课题亟待研究.其中比较典型的有:(1)量子阱中激子-声子强耦合体系的问题.不难看出,上述工作大多都集中在激子-声子弱、中耦合情形.对于体极化子,弱中耦合理论适用于电子-体纵光学声子耦合常数小于 6 的情形^[10],而对于表面或界面极化子这种限制约为 2.5^[11].弱耦合理论对 III-V 族化合物材料无疑是正确的.但近年来,随着分子束外延等高新技术的发展,II-VI 和 I-VII 族化合物材料被广泛注意.实际上,II-VI 和 I-VII 族化合物材料的带隙覆盖紫外到远红外区域,且其材料中的激子结合能也比 III-V 族化合物半导体材料的大,使此类材料的器件可能有效地在室温工作^[1].不过一般而言,II-VI 族化合物材料中的载流子-声子耦合常数比 III-V 族化合物材料中载流子-声子的耦合常数要大一个数量级,对于 I-VII 族的极性晶体,其载流子-声子之间的耦合更强,以至弱、中耦合理论不再适用.(2)准二维(quasi-two-dimensional, Q2D)系统中激子的热学性质及其机理分析.为了简单起见,人们一般都只限于讨论零温(0 K)极限情形.事实上,研究有限温度下低维结构中元激发的性质,对改善和提高

器件的热学性能具有重要的实际意义.20 世纪 80 年代报导了一些关于无限或半无限晶体中极化子的能量和有效质量的温度依赖性的新工作^[12,13].有趣的是,在这些理论研究中,由于采用不同的电子-声子耦合机制的假设和不同的理论近似,提供了两种完全相反的结论.Saitoh^[12]用费曼路径积分法得出极化子的能量和质量随温度的升高而减小;而 Peeters 等人^[13]则导出了相反的结果.后来,有不少的理论工作^[14-16]也得到了与 Saitoh 相同的结果,而另一些工作^[17,18]则得到了极化子的能量和质量随温度的升高而增加的结论.对不同的物质,实验结果也表明了相反的变化趋势^[19].另外, Lee 等人^[20]研究发现,在半无限大碘化钾晶体中,由电子-SO 声子强耦合所产生的极化子的自陷能与电子-LO 声子弱耦合所产生极化子的自陷能随温度的变化趋势截然相反.本文作者曾对量子阱中强耦合极化子的温度效应进行了深入细致的研究^[21,22].但是,迄今为止,人们对量子阱中激子-声子强耦合体系的温度依赖性的研究工作尚无报道.

本文采用 Huybrechts 线性组合算符法和 LLP 变分法研究了晶格热振动和极化子效应对量子阱中激子与界面光学声子强耦合又与体纵光学声子弱耦合体系的基态和激发态能量的影响,推导出作为量子阱宽和温度函数的激子基态能量移动和第一内部激发态能量移动的表达式.数值计算结果表明,不同支声子与激子相互作用所产生的激子基态能量移动和激发态能量移动,以及它们随量子阱宽和温度的变化情况大不相同.

2 有效哈密顿量

效仿文献^[3,4],采用无限高势阱近似考虑量子阱中的激子态.设由两种极性介质组成一个对称量子阱,

* 河北省自然科学基金(批准号:A2008000463)和河北科技师范学院博士基金(批准号:2006D001)资助项目

[†] 通信作者. Email: cerdunchaolu@sohu.com

2007-12-05 收到,2008-01-09 定稿

其中厚度为 $2d$ 的极性介质作为阱材料, 垒材料则为两边对称的无限大极性介质. 在有效质量近似下, 激子-晶格系统的哈密顿量可以写成:

$$H = \frac{P_{z_c}^2}{2m_c} + \frac{P_{z_h}^2}{2m_h} + \frac{P_R^2}{2M} + \frac{p_p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty 1} [\rho^2 + (z_c - z_h)^2]^{1/2}} + V_c(z_c) + V_h(z_h) + \sum_{k,m,p} a_{k,m,p}^+ a_{k,m,p} \hbar\omega_{LO} + \sum_{q,p} b_{q,p}^+ b_{q,p} \hbar\omega_{s,p} + \sum_{k,m,p} \{ B^* [W_{k,m,p}(z_c, z_h; \rho) a_{k,m,p}^+] e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} + h.c. \} + \sum_{q,p} \left[\frac{\sinh(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-qd} \{ C^* [V_{q,p}(z_c, z_h; \rho) b_{q,p}^+] e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} + h.c. \} \quad (1)$$

式中

$$B^* = [(-4e^2 \hbar\omega_{LO}/\Omega)(1/\epsilon_{\infty 1} - 1/\epsilon_{01})]^{1/2}, C^* = [-2e^2 \hbar\omega_{LO}/A(\epsilon_{01} - \epsilon_{\infty 1})]^{1/2}$$

$$W_{k,m,+}(z_c, z_h; \rho) = \frac{\cos\left(\frac{m\pi z_c}{2d}\right)}{\left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2\right]^{1/2}} e^{-is_2 k \cdot \rho} - \frac{\cos\left(\frac{m\pi z_h}{2d}\right)}{\left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2\right]^{1/2}} e^{-is_1 k \cdot \rho}, \quad m = 1, 3, \dots$$

$$W_{k,m,-}(z_c, z_h; \rho) = \frac{\sin\left(\frac{m\pi z_c}{2d}\right)}{\left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2\right]^{1/2}} e^{-is_2 k \cdot \rho} - \frac{\sin\left(\frac{m\pi z_h}{2d}\right)}{\left[k^2 + \left(\frac{m\pi}{2d}\right)^2\right]^{1/2}} e^{-is_1 k \cdot \rho}, \quad m = 2, 4, \dots$$

$$V_{q,\pm}(z_c, z_h; \rho) = G_{\pm}(q, z_c) \exp(-is_2 \mathbf{q} \cdot \rho) - G_{\pm}(q, z_h) \exp(is_1 \mathbf{q} \cdot \rho),$$

$$G_+(q, z) = \begin{cases} \frac{\cosh(qz)/\cosh(qd)}{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) - (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)} \left[\frac{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) - (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)}{(\epsilon_{01} + \epsilon_{02}) - (\epsilon_{01} - \epsilon_{02}) \exp(-2qd)} \right]^{1/4}, & |z| \leq d \\ \frac{\exp(-qz)/\exp(-qd)}{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) - (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)} \left[\frac{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) - (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)}{(\epsilon_{01} + \epsilon_{02}) - (\epsilon_{01} - \epsilon_{02}) \exp(-2qd)} \right]^{1/4}, & |z| > d \end{cases}$$

$$G_-(q, z) = \begin{cases} \frac{\sinh(qz)/\sinh(qd)}{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) + (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)} \left[\frac{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) + (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)}{(\epsilon_{01} + \epsilon_{02}) + (\epsilon_{01} - \epsilon_{02}) \exp(-2qd)} \right]^{1/4}, & |z| \leq d \\ \frac{\exp(-qz)/\exp(-qd)}{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) + (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)} \left[\frac{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) + (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)}{(\epsilon_{01} + \epsilon_{02}) + (\epsilon_{01} - \epsilon_{02}) \exp(-2qd)} \right]^{1/4}, & |z| > d \end{cases}$$

$$V_c(z_c) = \begin{cases} V_{\text{img}}(z_c), & |z_c| \leq d \\ V_{\text{img}}(z_c) + V_0, & |z_c| > d \end{cases}$$

$$V_h(z_h) = \begin{cases} V_{\text{img}}(z_h), & |z_h| \leq d \\ V_{\text{img}}(z_h) + V'_0, & |z_h| > d \end{cases}$$

$$V_{\text{img}}(z_c) = -\frac{e^2}{2\epsilon_{\infty 1} d} \left[\ln\left(\frac{2\epsilon_{\infty 2}}{\epsilon_{\infty 2} + \epsilon_{\infty 1}}\right) + \frac{(\epsilon_{\infty 2} - \epsilon_{\infty 1}) z_c^2}{(\epsilon_{\infty 2} + \epsilon_{\infty 1})(d^2 - z_c^2)} \right], \quad |z_c| \leq d$$

$$V_{\text{img}}(z_h) = \frac{e^2}{2\epsilon_{\infty 1} d} \left[\ln\left(\frac{2\epsilon_{\infty 2}}{\epsilon_{\infty 2} + \epsilon_{\infty 1}}\right) + \frac{(\epsilon_{\infty 2} - \epsilon_{\infty 1}) z_h^2}{(\epsilon_{\infty 2} + \epsilon_{\infty 1})(d^2 - z_h^2)} \right], \quad |z_h| \leq d$$

这里 m_c, m_h 和 $\mathbf{r}_c = (\mathbf{p}_c, z_c), \mathbf{r}_h = (\mathbf{p}_h, z_h)$, 分别表示电子与空穴的带质量和空间坐标; $\mathbf{R} = s_1 \mathbf{p}_c + s_2 \mathbf{p}_h$ ($s_1 = m_c/M, s_2 = m_h/M$), \mathbf{P}_R 和 $\mathbf{p} = \mathbf{p}_c - \mathbf{p}_h, \mathbf{p}_p$ 分别表示体系质心运动与相对运动的坐标和动量, $M = m_c + m_h, \mu = m_c m_h / (m_c + m_h)$; a_{kmp}^+ (a_{kmp}) 是频率为 ω_{LO} , 波矢为 (\mathbf{k}, k_m) , 宇称为 p 的 LO 声子的产生(湮灭)算符, $b_{q\sigma}^+$ ($b_{q\sigma}$) 表示频率为 ω_{σ} , 波矢为 \mathbf{q} 的 IO 声子的产生(湮灭)算符, p 为 $z=0$ 平面镜像对称的宇称, 取“+”或“-”, 取“+”时, m 取奇数, p 取“-”时, m 取偶数. 波矢 $k_z = m\pi/2d$ ($m = 1, 2, \dots, D/2$), $D = 2d/a$, a 为晶格常数. $\epsilon_{\infty 1}(\epsilon_{01})$ 和 $\epsilon_{\infty 2}(\epsilon_{02})$ 分别表示阱和垒材料的高频(静态)介电常数. V_0 和 V'_0 是势阱高度. Ω 和 A 分别表示量子阱的体积和界面面积.

首先, 我们对激子的质心坐标和动量引入线性组合算符^[23]

$$P_{Rj} = \left(\frac{M \hbar \lambda}{2} \right)^{1/2} (B_j + B_j^+)$$

$$R_j = i \left(\frac{\hbar}{2M\lambda} \right)^{1/2} (B_j - B_j^+), \quad (j = x, y) \quad (2)$$

其中 λ 为变分参数. 将(2)式代入(1)式, 并效仿一些文献中用变分法研究有限温度下的三维极化子的方法^[14,15], 讨论算符函数 $U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2$ 在 $|\Phi\rangle$ 态中的期待值

$$\bar{H} = \langle \Phi | U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 | \Phi \rangle \quad (3)$$

的极值问题, 其中

$$U_1 = \exp \left[-i \left(\sum_{k,m,p} A_1 a_{k,m,p}^+ a_{k,m,p} \mathbf{k} + \sum_{q,p} A_2 b_{q,p}^+ b_{q,p} \mathbf{q} \right) \cdot \mathbf{R} \right] \quad (4)$$

$$U_2 = \exp \left[\sum_{k,m,p} (a_{k,m,p}^+ f_{k,m,p} - a_{k,m,p} f_{k,m,p}^*) + \sum_{q,p} (b_{q,p}^+ g_{q,p} - b_{q,p} g_{q,p}^*) \right] \quad (5)$$

是 LLP 么正变换^[22], 式中 $f_{k,m,p}$ ($f_{k,m,p}^*$) 和 $g_{q,p}$ ($g_{q,p}^*$) 为变分参数, A_1 和 A_2 是表征电子(空穴)-声子耦合强

度的物理量,对于我们所研究的激子与 IO 声子强耦合又与 LO 声子弱耦合的体系, $A_1 = 1, A_2 = 0$ ^[23,24].

$$|\Phi\rangle = |\phi(\rho, \xi)\rangle |\Psi(z_c, z_h)\rangle |\{n_j\}\rangle |\{n_k\}\rangle |\{n_{q,p}\}\rangle \quad (6)$$

是有限温度下系统的尝试波函数,其中 $|\phi(\rho, \xi)\rangle$ 为二维激子内部波函数, $|\Psi(z_c, z_h)\rangle$ 为电子和空穴在 z 方向移动的本征函数, $|\{n_j\}\rangle, |\{n_k\}\rangle$ 和 $|\{n_{q,p}\}\rangle$ 分别描写激子的质心运动状态、LO 声子态和 IO 声子态在非零温时的波函数. 在有限温度时,晶格热振动不但激发实声子,同时也使抛物势阱中的载流子受到激发,激子的性质是激子-声子系对各种状态的统计平均. 如文献

[19]所述,在有限温度时,声子频率随温度的上升而下降,但很不明显,可以近似地将激子数 n_j , 声子数 n_k 和 $n_{q,p}$ 分别用以其平均数 \bar{n}, \bar{n}_k 和 $\bar{n}_{q,p}$ 代替,根据量子统计可得

$$\bar{n} = \left[\exp\left(\frac{\hbar \lambda}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1}, \bar{n}_k = \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}$$

$$\bar{n}_{q,p} = \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_{s,p}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (7)$$

这里考虑了载流子运动的对称性 $\bar{n} = n_j$ ($j = x, y$), k_B 是玻耳兹曼常数, T 为热力学温度.

将(1),(2)式和(4)~(7)式代入(3)式,得

$$\bar{H} = \langle \phi(\rho, \xi) | \langle \Psi(z_c, z_h) | F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda) | \Psi(z_c, z_h) \rangle | \phi(\rho, \xi) \rangle \quad (8)$$

式中

$$F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda) = \langle \{n_{q,p}\} | \langle \{n_k\} | \langle \{n_j\} | U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 | \{n_j\} \rangle | \{n_k\} \rangle | \{n_{q,p}\} \rangle$$

$$= \frac{P_{z_c}^2}{2m_e} + \frac{P_{z_h}^2}{2m_h} + \frac{p_\rho^2}{2\mu} - \frac{\xi e^2}{\epsilon_{\infty 1} \rho} + V_c(z_c) + V_h(z_h) +$$

$$\left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right) \hbar \lambda + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} \bar{n}_k (k^2 + u_1^2) + \sum_{q,p} n_{q,p} \hbar \omega_{s,p} +$$

$$\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} k^2 |f_{k,m,p}|^2 (4\bar{n}_k + 1) + \sum_{k,m,p} \hbar \omega_{LO} |f_{k,m,p}|^2 + \sum_{q,p} \hbar \omega_{s,p} |g_{q,p}|^2 +$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{k,m,p} (\nabla_{cz} f_{k,m,p}) (\nabla_{cz} f_{k,m,p}^*) + \frac{\hbar^2}{2m_h} \sum_{k,m,p} (\nabla_{hz} f_{k,m,p}) (\nabla_{hz} f_{k,m,p}^*) \right] (2\bar{n}_k + 1) +$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{k,m,p} (\nabla_\rho f_{k,m,p}) (\nabla_\rho f_{k,m,p}^*) (2\bar{n}_k + 1) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{q,p} (\nabla_\rho g_{q,p}) (\nabla_\rho g_{q,p}^*) (2\bar{n}_{q,p} + 1) +$$

$$\sum_{k,m,p} \left\{ B^* [W_{k,m,p}(z_c, z_h, \rho) f_{k,m,p}^*] + h.c. \right\} +$$

$$\sum_{q,p} \left[\frac{\sinh(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-qd} \left\{ C^* [V_{q,p}(z_c, z_h, \rho) g_{q,p}^*] D(\bar{n}, q) e^{-\frac{\hbar q^2}{4M\lambda}} + h.c. \right\} \quad (9)$$

其中

$$D(\bar{n}, q) = \langle \{n_j\} | \exp\left[-\left(\frac{\hbar q^2}{4M\lambda}\right)^{1/2} \sum_j B_j q_j\right] \exp\left[\left(\frac{\hbar q^2}{4M\lambda}\right)^{1/2} \sum_j B_j^+ q_j\right] | \{n_j\} \rangle$$

$$= 1 - \bar{n} \frac{\hbar q^2}{2M\lambda} + O\left(\frac{\hbar q^2}{2M\lambda}\right)^2 \quad (10)$$

而变分参数 ξ 可由下式确定^[4]

$$\langle \phi(\rho, \xi) \Psi(z_c, z_h) | \left. \frac{e^2}{\epsilon_{\infty 1}} \times \left[\frac{\xi}{\rho} - \frac{1}{[\rho^2 + (z_c - z_h)^2]^{1/2}} \right] \right| \Psi(z_c, z_h) \phi(\rho, \xi) \rangle = 0 \quad (11)$$

$F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda)$ 对 $f_{k,m,p}$ ($f_{k,m,p}^*$), $g_{q,p}$ ($g_{q,p}^*$) 和 λ 的变分极值称为激子基态的有效哈密顿量 H_{eff} . 对于慢速运动的激子,我们得到

$$H_{\text{eff}} = \min \{ F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda) \} = H_{\text{eff}}^0 + H'_{\text{eff}} \quad (12)$$

其中

$$H_{\text{eff}}^0 = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} \bar{n}_k (k^2 + u_1^2) + \sum_{q,p} \bar{n}_{q,p} \hbar \omega_{s,p} + H_{1D} + H_{2D} \quad (13)$$

是不考虑极化子效应时激子-声子系的哈密顿量,式中

$$H_{1D} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{z_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_{z_h}^2 + V_{\text{img}}(z_c) + V_{\text{img}}(z_h) + V_1^0(z_c) + V_1^0(z_h), & |z_c|, |z_h| \leq d \\ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{z_c}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_{z_h}^2 + V_{\text{img}}(z_c) + V_{\text{img}}(z_h) + V_0 + V'_0, & |z_c|, |z_h| > d \end{cases} \quad (14)$$

式中 $V_1^0(z_c)$ [$V_1^0(z_h)$] 是仅由电子(空穴)坐标 z_c (z_h) 所决定的、描写电子(空穴)与声子相互作用的有效势,其数学表达式冗长,这里从略. 但正如文献[4]所述,当 $V_0, V'_0 \rightarrow \infty$ 时, H_{1D} 可视为一维无限深方势阱中运动的电子-空穴两体的哈密顿量, H_{1D} 的本征值和本征函数可写成

$$E_{l_1 l_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2 l_1^2}{8m_e d^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2 l_2^2}{8m_h d^2}, \quad l_1, l_2 = 1, 2, 3, \dots, N \quad (15)$$

$$|\Psi_{l_1 l_2}^{\text{ID}}\rangle = |\Psi_{l_1}(z_c)\Psi_{l_2}(z_h)\rangle = \begin{cases} \frac{1}{d} \sin\left[\frac{\pi l_1(z_c + d)}{2d}\right] \sin\left[\frac{\pi l_2(z_h + d)}{2d}\right], & |z_c|, |z_h| \leq d \\ 0, & |z_c|, |z_h| > d \end{cases} \quad (16)$$

$$H_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\rho}^2 - \frac{\xi e^2}{\epsilon_{\infty 1} \rho} \quad (17)$$

描写激子在 x - y 平面内内部运动的能量,且在形式上与二维类氢原子系的哈密顿量相同,因此, H_{2D} 的本征值和本征函数为^[3]

$$E_n^{2D} = -\frac{e^2 \xi^2}{2\epsilon_{\infty 1} a_0 (n + 1/2)^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (18)$$

$$|\phi_{n,l}^{2D}\rangle = \frac{e^{i\varphi}}{(2\pi)^{1/2}} R_{n,l} [2/(n + 1/2) a_0'], \quad (19)$$

$$l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n,$$

其中 $\xi a_0' = a_0 = \epsilon_{\infty 1} \hbar^2 / \mu e^2$ 不难看出,在不考虑极化子效应时,激子(裸激子)的能量为

$$E_n = E_{l_1 l_2} + E_n^{2D} \quad (20)$$

其中 E_n^{2D} 表示二维裸激子内部运动的能量.

利用变分法,可以算得考虑极化子效应时的激子能量,

$$E = \langle \phi_{n,l}^{2D} | \langle \Psi_{l_1 l_2}^{\text{ID}} | H_{\text{eff}} | \Psi_{l_1 l_2}^{\text{ID}} \rangle | \phi_{n,l}^{2D} \rangle = E_n + E'_n \quad (21)$$

式中 E'_n 是由极化子效应所产生的激子能量移动,它由两部分组成:

$$E'_n = \Delta E_n^{\text{LO}} + \Delta E_n^{\text{IO}} \quad (22)$$

其中 ΔE_n^{LO} 和 ΔE_n^{IO} 分别表示由激子-LO 声子弱耦合和激子-IO 声子强耦合所产生的极化子效应对激子能量的贡献.为了具体起见,下面我们分别给出由极化子效应所产生的激子基态能量移动和激发态能量移动的具体表达式.

对基态($l_1 = 1, l_2 = 1; n = 0, l = 0$):

$$E'_0 = \Delta E_0^{\text{LO}} + \Delta E_0^{\text{IO}} \quad (23)$$

其中

$$\Delta E_0^{\text{LO}} = \frac{2^{12} \xi_{1100}^2}{\pi^2 du_1} \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \sum_{1,3,5,\dots}^{N/2} \frac{1}{m^2 (4 - m^2)^2} \times \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \left[1 + \frac{Ms_1 s_2 (4 \bar{n}_k + 1)x}{\mu [x(4 \bar{n}_k + 1) + 1]} \right] \times \frac{y J_0^{(k)}(x, y)}{[x(4 \bar{n}_k + 1) + 1] \left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_1} \right)^2 \right]} \exp(-4\xi_{1100} y) dx dy \quad (24)$$

$$\Delta E_0^{\text{IO}} = 128 \epsilon_{01} \epsilon_{\infty 1} du_1 \xi_{1100}^2 \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dx dy \left[\frac{\pi^2}{x(x^2 + \pi^2)} \right]^2 \times \left[1 + \frac{Ms_1 s_2 (2 \bar{n}_{q,+} + 1)x^2}{\mu d^2 u_{s,+}^2} \right] \frac{\sinh^2(x) \tanh(x) J_0^{(q)}(x, y)}{\epsilon(x) d^2 u_{s,+}^2} \times \exp(-2x - 4\xi_{1100} y) \exp\left(-\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_1^2 \lambda}\right) \left[1 - \bar{n} \left(\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_1^2 \lambda} - 1 \right) \right] \quad (25)$$

对第一内部激发态($l_1 = 1, l_2 = 1; n = 0, l = \pm 1$):

$$E'_1 = \Delta E_1^{\text{LO}} + \Delta E_1^{\text{IO}} \quad (26)$$

其中

$$\Delta E_1^{\text{LO}} = \frac{2^9 \xi_{111\pm 1}}{9\pi^2 du_1} \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \sum_{1,3,5,\dots}^{N/2} \frac{1}{m^2 (4 - m^2)^2} \times \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dx dy \left[1 + \frac{Ms_1 s_2 (4 \bar{n}_k + 1)x}{\mu [x(4 \bar{n}_k + 1) + 1]} \right] \times \frac{J_0^{(k)}(x, y)}{[x(4 \bar{n}_k + 1) + 1] \left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_1} \right)^2 \right]} \left(\frac{4\xi_{111\pm 1} y}{3} \right)^3 \times \exp\left(-\frac{4\xi_{111\pm 1} y}{3}\right) \quad (27)$$

$$\Delta E_1^{\text{IO}} = \frac{16 \epsilon_{111\pm 1} \epsilon_{01} \epsilon_{\infty 1} du_1}{9} \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dx dy \left[\frac{\pi^2}{x(x^2 + \pi^2)} \right]^2 \times \left[1 + \frac{Ms_1 s_2 (2 \bar{n}_{q,+} + 1)x^2}{\mu d^2 u_{s,+}^2} \right] \times \left(\frac{4\xi_{111\pm 1} y}{3} \right)^3 \times \frac{\sinh^2(x) \tanh(x) J_0^{(q)}(x, y)}{\epsilon(x) d^2 u_{s,+}^2} \times \exp(-2x - 4\xi_{111\pm 1} y) \exp\left(-\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_1^2 \lambda}\right) \left[1 - \bar{n} \left(\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{d^2 u_1^2 \lambda} - 1 \right) \right] \quad (28)$$

式中 $N = 2d/a$ (a 为晶格常数); $\alpha = (Me^2/\hbar^2 u_1)(1/\epsilon_{\infty 1} - 1/\epsilon_{01})$; $\hbar^2 u_1^2/2M = \hbar \omega_{\text{LO}}$, $\hbar^2 u_{s,p}^2/2M = \hbar \omega_{s,p}$; $\epsilon(x) = [\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2} - (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2})e^{-2x}]^{3/2} [\epsilon_{01} + \epsilon_{02} - (\epsilon_{01} - \epsilon_{02})e^{-2x}]^{1/2}$, $J_0^{(k)}(x, y)$ 和 $J_0^{(q)}(x, y)$ 是零阶的 Bessel 函数,参数 $\xi_{l_1 l_2 nm}$ 可利用“自恰法”从(11)式确定,图 1 表示参数 ξ_{1100} 和 $\xi_{111\pm 1}$ 随量子阱宽 N 的变化关系.

3 结果与讨论

为了更清楚地说明晶格热振动和极化子效应对量子阱中激子与 IO 声子强耦合又与 LO 声子弱耦合体系能量的影响.我们选择了 AgBr 和 AgCl 作为量子阱内、外极性介质进行数值计算.所用材料的参数如表 1 所示,数值结果分别示于图 1~6,图中以 $\alpha \hbar \omega_{\text{LO}}$ 作为能量单位.

图 2 表示不考虑声子效应时激子(裸激子)的基态能量 E_0 、第一激发态(以下简称激发态)能量 E_1 、二维裸激子内部运动的基态能量 E_0^{2D} 和激发态能量 E_1^{2D} 随量子阱宽 N 的变化关系.由图 2 可以看出,当 $N > 16.12$ 时,

表 1 材料的特征参数^[25,26]

Table 1 Characteristic parameters of material^[25,26]

材料	ϵ_{∞}	ϵ_0	m_e/m_0	m_h/m_0	$\hbar \omega_{\text{LO}}/\text{meV}$	$\hbar \omega_{\text{TO}}/\text{eV}$
AgBr	4.62	12.44	0.215	0.52	17.07	11.35
AgCl	3.97	9.5	0.302	—	23.02	14.88

注: m_e 是电子带质量, m_h 空穴质量, m_0 是裸电子质量.

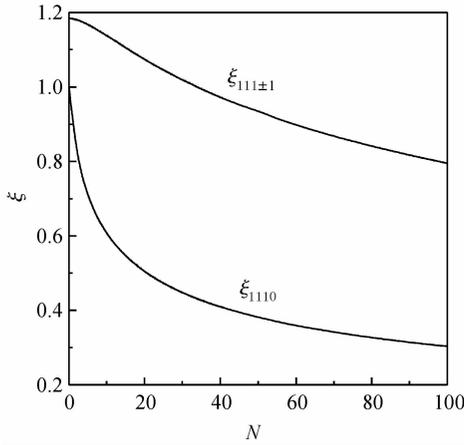


图 1 参数 ξ 随阱宽 N 的变化关系

Fig.1 Variation of the parameter ξ with the well widths N

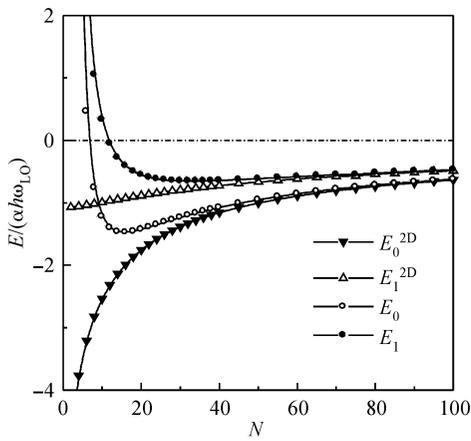


图 2 裸激子的基态能量 E_0 和激发态能量 E_1 随阱宽 N 的变化关系

Fig.2 Variation of the ground state energy E_0 and the excited state energy E_1 of a bare exciton with the well widths N

E_0 随 N 的减小而逐渐显著减小,并在 $N = 16.12$ 处达到极小值,之后随 N 的减小而迅速增大直至取正值.这表明, $N = 16.12$ 是裸激子形成一个稳定基态的阱宽;当 $N > 32.52$ 时, E_1 随 N 的减小而缓慢减小,并在 $N = 32.52$ 处达到极小值,之后随 N 的减小而迅速增大直至取正值.这表明 $N = 32.52$ 是裸激子的激发态形成一个亚稳态的阱宽.由图还可看出,当阱宽较小时,量子限制效应比较显著,随着 N 的增加, E_0 和 E_1 的取值将分别逼近二维裸激子的 E_0^{2D} 和 E_1^{2D} .

图 3 分别描述了 AgCl/AgBr/AgCl 量子阱中由 LO 声子效应和 IO 声子效应所产生的激子基态能量移动 ΔE_0^{LO} 和 ΔE_0^{IO} 在不同温度 T 下随阱宽 N 的变化关系.从图 3(a)可以看出,对于给定的 N , ΔE_0^{LO} 随 T 的升高而减小.这一结果与文献[20]中得到的由电子-LO 声子弱耦合所产生的极化子自陷能的温度依赖性一致,这表明激子-LO 声子弱相互作用的物理机制也是以激子先吸收再发射声子的过程为主,换句话说,随着温度的升高,晶格的热振动增强,激子-LO 声子相互作用减弱,直至激子完全失去它的声子云而变为准自由粒子,所以 ΔE_0^{LO} 随 T 的升高而减小.由图还可看出,在 N 较小时,

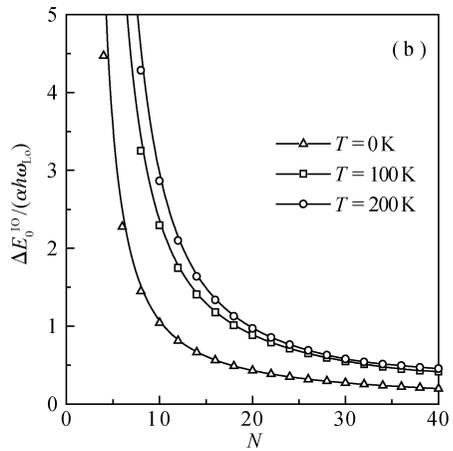
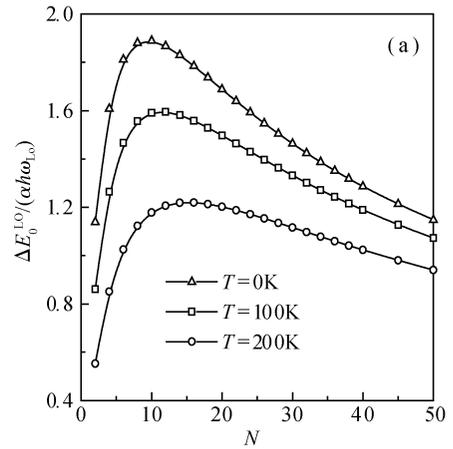


图 3 由 LO 声子效应和 IO 声子效应引起的激子基态能量移动 ΔE_0^{LO} 和 ΔE_0^{IO} 随阱宽 N 和温度 T 的变化

Fig.3 Ground state energy shift ΔE_0^{LO} and ΔE_0^{IO} of the exciton, which are induced by the LO phonon effect and the IO phonon effect, respectively, with well widths N and temperature T

ΔE_0^{LO} 随 N 的增加而迅速增大并达到一个极大值,然后再缓慢减小. ΔE_0^{LO} 取极值的 N 值随 T 的升高而变大,图中给出了温度 0, 100 和 200K 时, ΔE_0^{LO} 取极大值的阱宽分别为 9.85, 11.48 和 15.07.

由图 3(b)可以看出,对于给定的 N , ΔE_0^{IO} 随 T 的升高而增大.显然, ΔE_0^{IO} 的温度依赖性与上述 ΔE_0^{LO} 的温度依赖性恰好相反,但与文献[20]中所述的由电子-SO 声子强耦合所产生的极化子自陷能的温度依赖性一致,这表明激子-IO 声子强相互作用的机制是以激子发射再吸收声子的过程为主,这是激子的一种自陷过程,是激子-IO 声子相互作用所导致的激子能谱的非抛物性的结果.从图 3(b)还可以看出,在阱宽较小 ($N < 20$) 时, ΔE_0^{IO} 的量值较大,但随着 N 的增加 ΔE_0^{IO} 的量值单调快速减小.这表明 IO 声子效应对窄阱中激子基态的影响较大.

图 4 分别给出了由 LO 声子效应和 IO 声子效应所产生的激子第一内部激发态能量移动 ΔE_1^{LO} 和 ΔE_1^{IO} 在不同温度 T 下随阱宽 N 的变化关系.比较图 4(a)和图 3(a)可以看出, ΔE_1^{LO} 的量值和随 T 变化的幅度比

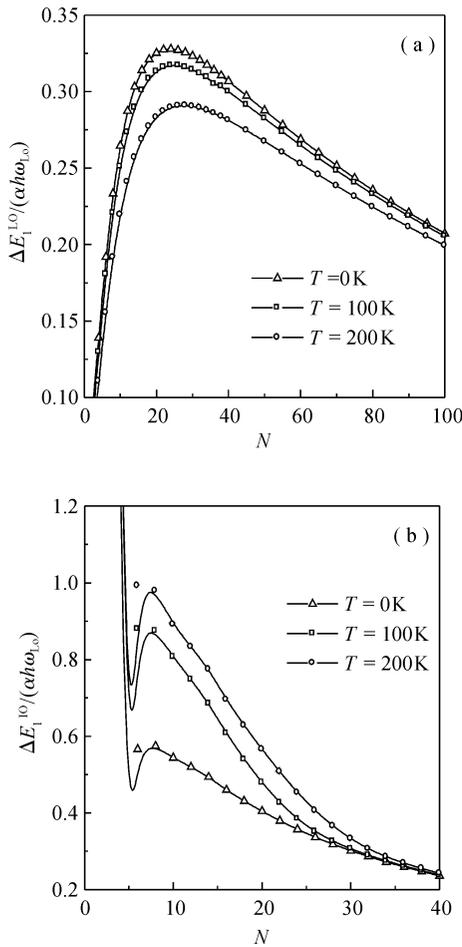


图 4 由 LO 声子效应和 IO 声子效应所产生的激子第一激发态能量的移动 ΔE_1^{10} 和 ΔE_1^{10} 随阱宽 N 和温度 T 的变化

Fig. 4 First excited state energy shift ΔE_1^{10} and ΔE_1^{10} of the exciton, which are induced by the LO phonon effect and the IO phonon effect, respectively, with well widths N and temperature T

ΔE_0^{10} 要小,这说明 LO 声子效应对激子激发态能量的影响比起它对基态能量的影响要弱些. 除此之外,两者随 T 和 N 的变化规律基本一致.

由图 4(b)可以看出,在 $N < 30$ 时, ΔE_1^{10} 随 N 的减小而显著增大,并在 $N = 7.48$ 处达到一个极大值,后又迅速减小,并在 $N = 5.46$ 处达到一个极小值,然后又迅速增大. 由图 4(b)也不难看出, ΔE_1^{10} 取极值的 N 值与 T 无关. 另外,在阱宽较小 ($N < 30$) 时, ΔE_1^{10} 的量值较大,而且随 T 和 N 的变化非常显著. 随着阱宽的增加, ΔE_1^{10} 的量值迅速减小,而且受 T 的影响非常小.

图 5 描述了由 LO 声子效应和 IO 声子效应共同产生的激子基态能量移动总 E_0' 随阱宽 N 和温度 T 的变化. 由图 5 可以看出,在阱宽较小 ($N < 12$) 时, E_0' 随 T 的升高而增大. 这表明在阱宽较小时, IO 声子效应对 E_0' 的贡献占主导地位. 随着 N 的增大, E_0' 随 T 的升高在某些 N 处出现突变,即 E_0' 由随 T 的升高而增大变为随 T 的升高而减小,这说明在阱宽较大时, LO 声子效应对 E_0' 的贡献是主要的.

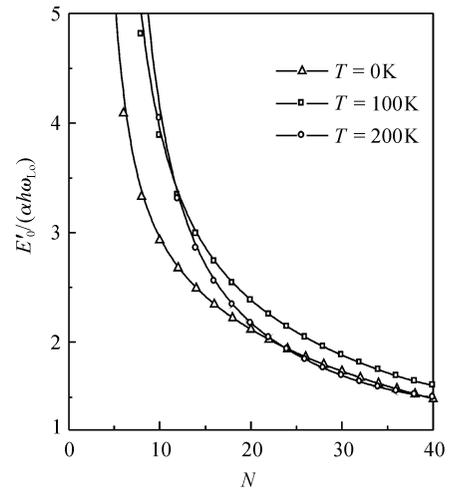


图 5 由极化子效应所产生的激子基态能量总移动 E_0' 随阱宽 N 和温度 T 的变化

Fig. 5 Total shift E_0' of the ground state energy of the exciton induced by the polaron effects with well widths N and temperature T

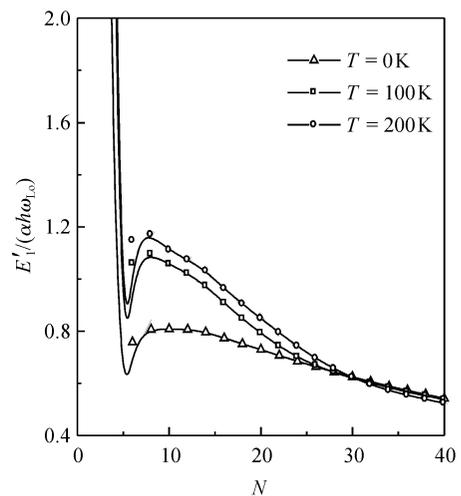


图 6 由极化子效应所产生的激子第一激发态能量总移动 E_1' 随阱宽 N 和温度 T 的变化

Fig. 6 Total shift E_1' of the first excited state energy of the exciton induced by the polaron effects with well widths N and temperature T

图 6 给出了由 LO 声子效应和 IO 声子效应共同引起的激子第一内部激发态能量总移动 E_1' 随阱宽 N 和温度 T 的变化. 由图 6 可以看出,当 $N < 30$ 时, E_1' 随 T 和 N 的变化规律与 ΔE_0^{10} 随 T 和 N 的变化规律基本一致,这说明在阱宽较小时, IO 声子效应对 E_1' 的贡献占主导地位. 随着 N 的增大,不同温度下的各 E_1' 曲线在 $N = 30.01$ 处相交,这说明, $N = 30.01$ 是 LO 声子效应和 IO 声子效应正好相互抵消的阱宽. 当 $N > 30$ 时, E_1' 随 T 和 N 的增加而减小,但并不明显,这说明尽管在阱宽较大时, LO 声子效应对 E_1' 的贡献起主要作用,但对温度的依赖性并不显著. 总之,极化子效应对激子激发态的影响主要来自 IO 声子效应.

4 结论

本文采用线性组合算符和 LLP 变分法研究了晶格热振动和极化子效应对量子阱中激子与 IO 声子强耦合又与 LO 声子弱耦合体系的基态和激发态能量的影响,以 AgCl/AgBr 量子阱为例进行了数值计算. 结果表明: (1) 由极化子效应所产生的激子能量总移动可以写成两部分: $E'_n = \Delta E_n^{\text{LO}} + \Delta E_n^{\text{IO}}$, 其中 ΔE_n^{LO} 来自激子-LO 声子弱耦合, 而 ΔE_n^{IO} 则来自激子-IO 声子强耦合. (2) 对于基态和第一内部激发态, ΔE_0^{LO} 和 ΔE_1^{LO} 随温度 T 的升高而减小, 而 ΔE_0^{IO} 和 ΔE_1^{IO} 随温度 T 的升高而增大, 表明激子-LO 声子弱耦合的物理机制与激子-IO 声子强耦合的物理机制不同. (3) ΔE_0^{LO} 和 ΔE_1^{LO} 都随阱宽 N 的增加而迅速增大并达到最大值, 然后再缓慢减小. ΔE_0^{LO} 和 ΔE_1^{LO} 取极大值的 N 值随 T 的升高而变大; ΔE_0^{IO} 随 N 的减小而单调快速增大, 而 ΔE_1^{IO} 随 N 的减小而显著变化的过程中, 在 $N \approx 7.48$ 和 5.46 处分别取一个极大值和一个极小值, 而且 ΔE_1^{IO} 取极值的 N 值与 T 无关. (4) 极化子效应对激子基态的影响, 在阱宽较小时, IO 声子效应的贡献占主导地位, 而在阱宽较大时, LO 声子效应的贡献是主要的; 而极化子效应对激子激发态的影响则主要来自 IO 声子效应.

本文的方法和结果适用于无限势垒量子阱中的载流子-声子耦合体系的基态, 其中载流子与 LO 声子的耦合常数小于 6, 与 IO 声子的耦合常数大于 2.5, 温度低于德拜(Debye)温度. 实际的量子阱都是有限势垒量子阱, 由于该结构中电子(空穴)-声子相互作用更加复杂, 有待于对计算方法等作进一步的改进.

参考文献

- [1] Zhang X Q, Wang Y S, Xu Z, et al. Exciton recombination dynamics in Te/CdZnTe quantum wells. *Acta Phys Sin*, 1999, 48(1): 180 (in Chinese) [张希清, 王永生, 徐征, 等. Te/CdZnTe 多量子阱激子复合动力学性质的研究. *物理学报*, 1999, 48(1): 180]
- [2] Yan H Q, Tang C, Zhang H, et al. The variable metric algorithm for ground state energy of ionized-donor-bound excitons in semiconductors. *Acta Phys Sin*, 2004, 53(11): 3877 (in Chinese) [闫海青, 唐晨, 张峰, 等. 半导体束缚激子基态能的变尺度法. *物理学报*, 2004, 53(11): 3877]
- [3] Yiang Q L, Mao J Q, Gu S W. Intermediate exciton in quantum well. *J Phys: Condens Matter*, 1989, 1: 10343
- [4] Miao J Q, Yang Q L, Gu S W. Exciton-phonon system in a polar semiconductor quantum well. *Phys Rev*, 1989, B40: 9846
- [5] Guo Z Z, Liang X X, Ban S L. Pressure effect on the interface excitons in a type-II ZnTe/CdSe heterojunction. *Modern Physics Letters B*, 2003, 17(27/28): 1425
- [6] Guo Z Z, Liang X X, Ban S L. Pressure-induced increase of exciton-LO phonon coupling in a ZnCdSe/ZnSe quantum well. *Phys Status Solidi B*, 2003, 238(1): 173
- [7] Zhang Y T, Di B, Xie Z, et al. Binding energies of excitons in square quantum well wires in the presence of a magnetic field. *Chin Phys Lett*, 2004, 21(1): 166
- [8] Escorcia R A, Riva C, Mikhailov I D. Polaronic exciton in quantum wells wires and nanotubes. *Solid State Commun*, 2004, 131: 365
- [9] Zhang H, Liu L, Liu J J. Binding energies of excitons in symmetrical GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As double quantum wells. *Acta Phys Sin*, 2007, 56(1): 0487 (in Chinese) [张红, 刘磊, 刘建军. 对称 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As 双量子阱中激子的束缚能. *物理学报*, 2007, 56(1): 0487]
- [10] Haga E. Note on the slow electron in polar crystal. *Progr Theor Phys*, 1954, 11: 449
- [11] Pan J S. The surface or interface polaron in polar crystals. *Phys Status Solidi B*, 1985, B127: 307
- [12] Saitoh M. Theory of a polaron at finite temperature. *Phys Soc Jpn*, 1980, 49: 878
- [13] Peeters F M, Devreese J T. Temperature dependence of the polaron mass in AgBr. *Phys Rev*, 1985, B31: 5500
- [14] Li Y C, Gu S W. Temperature dependence of the effective mass of the interface polaron. *J Phys: Condens Matter*, 1990, 2: 1149
- [15] Xiao J L, Eerdunchaolu, Xiao W. Magnetic field and temperature dependence of the mass of a surface polaron in polar crystals. *J Phys Soc Jpn*, 2002, 71(5): 1332
- [16] Eerdunchaolu, Xiao W, Xiao J L. Magnetic field and temperature dependence of the surface polaron in polar crystals. *Int J Mod Phys*, 2004, B18: 2003
- [17] Fedyanin V K, Rodriguez C. Temperature and coupling strength dependence of polaron effective mass and radius. *Phys Status Solidi B*, 1982, 110: 105
- [18] Qin R H, Gu S W. Temperature dependence of the electron self-energy in a polar-crystal slab. *Solid State Commun*, 1997, 104: 425
- [19] Brummell M A, Nicholas R J, Hopkins M A, et al. Modification of the electron-phonon interactions in GaAs-GaAlAs heterojunctions. *Phys Rev Lett*, 1987, 58: 77
- [20] Lee C M, Gu S W, Lam C C. Temperature dependence of strongly coupled surface polaron in potassium iodide semi-infinite polar crystal. *Physica B*, 1996, 229: 361
- [21] Eerdunchaolu. Temperature dependence of the self-trapping energy of the polaron of the electron-interface optical phonons strong-coupling in a quantum well. *J Infrared Millim Waves*, 2005, 24(2): 89 (in Chinese) [额尔敦朝鲁. 量子阱中强耦合极化子自陷能的温度依赖性. *红外与毫米波学报*, 2005, 24(2): 89]
- [22] Eerdunchaolu, Xiao Jinglin. Effects of lattice vibration on the properties of the strong-coupling polaron in a quantum well. *J Phys Soc Jpn*, 2007, 76(4): 044702
- [23] Huybrechts J. Note on the ground-state energy of the Feynman polaron. *J Phys C: Solid State Phys*, 1976, 9: L211
- [24] Lee T D, Low F M, Pines D. The motion of slow electrons in a crystal. *Phys Rev*, 1953, 90: 297
- [25] Albrich C, Bajaj K K. Binding energy of a Mott-Wannier exciton in a polarizable medium. *Solid State Commun*, 1997, 22(2): 157
- [26] Balderschi A, Czaja W, Tosatti E, et al. The physics of latent image formation in silver halides. Singapore: World Scientific, 1984: 1

Temperature Dependence of the Energies of Quasi-Two-Dimensional Strong-Coupling Excitons*

Eerdunchaolu[†]

(Department of Mathematics and Physics, Hebei Normal University of Science & Technology, Qinhuangdao 066004, China)

Abstract: The influences of lattice vibration and polaron effects on the ground state and the excited state of the system, for which the exciton is strongly coupled with interface-optical (IO) phonons but weakly or intermediately coupled with bulk-longitudinal-optical (LO) phonons in a quantum well, are studied using the linear-combination operator and the LLP variational method. The expressions for the ground state energy shift and the first internal excited state energy shift of the exciton as a function of the well width and temperature are derived. Numerical calculations for an AgCl/AgBr/AgCl QW, for example, are performed. The results indicate that the ground state energy shift and the first internal excited state energy shift increases with the temperature for strong exciton-IO-phonon coupling but decreases with the temperature for weak exciton-LO-phonon coupling.

Key words: strong-coupling exciton; energy shift; polaron effect; temperature dependence

PACC: 6320K; 7138

Article ID: 0253-4177(2008)07-1318-08

* Project supported by the Natural Science Foundation of Hebei Province (No. A2008000463) and the PhD Foundation of Hebei Normal University of Science & Technology (No. 2006D001)

[†] Corresponding author. Email: eerdunchaolu@sohu.com

Received 5 December 2007, revised manuscript received 9 January 2008

©2008 Chinese Institute of Electronics