

势阱形状对电场下量子阱子带和 激子能移的影响

朱嘉麟 唐道华 顾秉林 熊家炯

(清华大学现代应用物理系, 北京)

1988年7月8日收到

在束缚态近似下, 用级数解法求解电场下各种不同形状 GaAs/GaAlAs 量子阱中电子和空穴子带, 进一步采用变分方法得到激子结合能. 由此, 我们首次得到电场下由抛物阱至方位阱子带和激子峰能移的变化图象. 在考虑 GaAs/GaAlAs 量子阱形状影响的基础上, 我们计算所得结果与实验吻合得很好.

主题词: 量子阱、激子、GaAs/GaAlAs

一、引 言

电场对 GaAs/GaAlAs 量子阱光学性质的影响正越来越引起人们的关注^[1-10]. 激子在谱中产生很强的尖峰, 它对量子阱系统的光学性质起着重要作用. 利用纯粹的光学手段例如光致发光、光吸收和反射等, 人们已对 GaAs/GaAlAs 量子阱的量子效应作了一系列研究. 最近, 同时应用光和输运方法的光电流技术已经被用来研究量子阱的特征^[5, 9, 10]. 研究表明光电流技术与上述纯光学测量一样, 它也可提供等价的信息. 但是, 光电流测量涉及到外加电场对激子的影响, 电场可改变跃迁强度、寿命以及引起激子峰的能移. 有关量子阱激子峰的能移, 人们已从实验^[5, 10]和理论^[1, 4, 10]两个方面作了广泛的研究. 从理论上来说, 激子峰在电场作用下的能移可由量子阱电子和空穴子带在电场下的能移以及激子结合能的变化确定. 至今, 主要由二种势模型用来确定该能移, 一种模型对子带和激子均采用电场下的无限量子阱描述^[2]; 另一种对子带采用无电场的有效量子阱描述, 然后将电场作为微扰处理, 而对激子用电场下的无限或有效无限势阱描述^[10], 通过变分计算得到结合能. 为得到较强电场下子带和激子能移的正确计算值, 上述二类势模型和相应解法是有一定问题的. 不同于上述二种模型和相应的计算方法, 对子带和激子结合能我们同时采用更为合理的有限位阱模型和较为优越又灵活的级数解法得到了与实验符合得相当好的计算结果. 本文主要对电场下不同形状 GaAs/GaAlAs 有限量子阱中的子带和激子峰能移以及重叠函数作出研究, 以便得出量子阱形状对子带和激子特征影响的一个完整图象和对实验测量结果作出更为合理的解释.

二、理论模型

在有效质量近似下，量子阱中受垂直阱层方向 z 的电场作用的激子哈密顿量可写成^[2,11]

$$H = H_{ex} + H_{hx} + \frac{P_x^2 + P_y^2}{2M} + \frac{P_z^2 + P_z'^2}{2\mu} - \frac{e^2}{8r} \quad (1)$$

其中

$$H_{ex} = -\frac{\hbar^2}{2m_{ex}} \frac{d^2}{dx^2} + eFz_e + V_e(z_e) \quad (2)$$

$$H_{hx} = -\frac{\hbar^2}{2m_{hx}} \frac{d^2}{dz_h^2} - eFz_h + V_h(z_h) \quad (3)$$

m_{ex} 和 m_{hx} 分别为沿 x 方向的电子和空穴的有效质量， F 为沿 z 方向的电场强度， $V_e(z_e)$ 和 $V_h(z_h)$ 分别为电子和空穴所受之势。本文除有限方位阱形式

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |z| < \frac{L}{2} \\ V_0 & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4a)$$

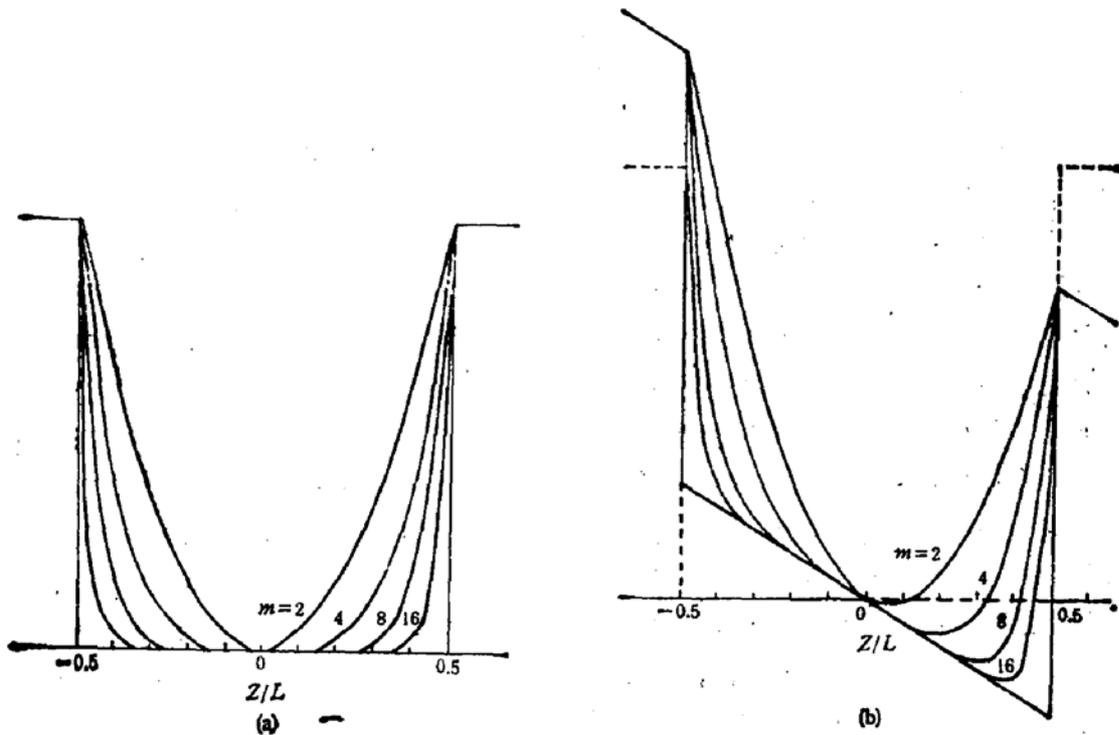


图1 (a) 图为无电场时,各种量子阱 ($m = 2, 4, 8, 16, \infty$) 势函数随约化坐标 z/L 的变化; (b) 图为有电场时,总的势函数(仅对空穴而言)

$$V(z) = \begin{cases} \frac{2^m V_0}{1^m} z^m - eFz & (m = 2, 4, 8, 16, \infty) \quad |z| < \frac{L}{2} \\ V_0 - eFz & |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases}$$

随约化坐标 z/L 的变化.

外,还取量子阱的形状为(如图 1 所示):

$$V(x) = \begin{cases} \frac{2^m V_0}{L^m} x^m (m = 2, 4, 6, 8, \dots) & |x| < \frac{L}{2} \\ V_1 & |x| \geq \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4b)$$

(4)式中 L 和 V_0 分别为有限方位阱的宽和深。

(1)式中第三和第四项分别为 xy 平面内质心运动和电子-空穴相对运动的动能算子。

$$M = m_{xye} + m_{xyh} \\ \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_{xye}} + \frac{1}{m_{xyh}} \quad (5)$$

其中 m_{xye} 和 m_{xyh} 分别为 xy 平面内电子和空穴的有效质量。对 GaAs, 我们取各向同性的电子有效质量, 即 $m_{xye} = m_{xye}$, 取如下各向异性的空穴有效质量形式

$$\frac{1}{m_{xh}} = \frac{1}{m_0} (r_1 \mp 2r_2) \\ \frac{1}{m_{yh}} = \frac{1}{m_0} (r_1 \pm r_2) \quad (6)$$

其中 r_1 和 r_2 为价带的 Luttinger 参数^[22], m_0 为自由电子质量。(6)式中上面和下面符号分别对应重空穴和轻空穴。(1)式中最后一项描述电子和空穴的库仑相互作用, r 为电子和空穴的相对距离, ϵ 为与位置无关的介电常数。

由于所研究的量子阱较窄,我们用不同电子和空穴子带相应的准二维 $1s$ 激子描述量子阱中各激子态,取如下激子变分波函数形式

$$\Phi(z_e, z_h, \rho, \alpha) = \phi_{l_e}(z_e) \phi_{l_h}(z_h) \phi_{1s}(\rho, \alpha) \quad (7)$$

这里已略去了 xy 平面内的质心运动, $\phi_{l_e}(z_e)$ 和 $\phi_{l_h}(z_h)$ 分别为(2)和(3)式哈密顿量相应的第 l_e 电子和第 l_h 空穴子带的归一波函数, $\phi_{1s}(\rho, \alpha)$ 为二维类氢归一基态波函数形式^[23]

$$\phi_{1s}(\rho, \alpha) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \exp(-\alpha\rho) \quad (8)$$

其中 ρ 为电子和空穴在 xy 平面内的相对距离, α 为变分参数。对 α 进行变分计算, 我们可得激子的能量为

$$E_{(l_e, l_h)} = \min \langle \Phi | H | \Phi \rangle \quad (9)$$

应该指出,在量子阱层方向存在电场时,对有限量子阱来说不具有任何束缚态。但是,如果电场 F 不是非常强,则可有长寿命共振态存在。在电场满足下述条件时,可认为寿命足够长^[9],

$$|e| F q_0^{-1} \ll \frac{\hbar^2 q_0^2}{2m_s} \quad (10)$$

其中 q_0^{-1} 为零电场波函数在全中指数衰减的特征长度。D. A. B. Miller 等人称这种现象为量子约束效应^[20], 他们用隧道共振的方法确定了有限势垒量子阱中量子态的半宽度 ΔE , 发现当阱宽为 95 \AA , 电场高达 $10 \times 10^4 \text{ V/cm}$ 时, ΔE 仍是很小的 ($\leq 0.1 \text{ meV}$), 也

就是寿命 ($\sim \hbar/\Delta E$) 是较长的, 证实了量子约束效应。夏建白和黄昆^[3] 对电场下有限量子阱所作计算也证实了在一定条件下作稳定态近似是可行的。我们将 x 方向的空穴哈密顿量写成

$$H_s = H_{s_0} + H'_s \quad (11)$$

其中

$$H_{s_0} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_{s_h}} \frac{d^2}{dz_h^2} + V_0 + \frac{eFL}{2} & (z_h \leq -\frac{L}{2}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m_{s_h}} \frac{d^2}{dz_h^2} - eFz_h + \frac{2mV_h}{L^m} z_h^m & (|z_h| < \frac{L}{2}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m_{s_h}} \frac{d^2}{dz_h^2} + V_0 - \frac{eFL}{2} & (z_h \geq \frac{L}{2}) \end{cases} \quad (12)$$

和

$$H'_s = \begin{cases} -eF(z_h + \frac{L}{2}) & (z_h \leq -\frac{L}{2}) \\ 0 & (|z_h| < \frac{L}{2}) \\ -eF(z_h - \frac{L}{2}) & (z_h \geq \frac{L}{2}) \end{cases} \quad (13)$$

用级数解法, 可得(12)式所示 H_{s_0} 的束缚态能级, 将 H'_s 作为微扰项处理。由于波函数在垒中衰减较快, H'_s 可较小以致得到相当精确的较长寿命的准定态能级和波函数。同样, 我们可对电子哈密顿量作完全类似处理。

三、计算方法

求解电场下有限量子阱中电子和空穴的量子能级即求解具有电荷 q (对空穴和电子, q 分别为 e 和 $-e$), 质量为 m_s (对空穴和电子, m_s 分别为 m_{s_h} 和 m_{s_e}) 粒子的如下薛定谔方程:

$$H_s \phi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_s} \frac{d^2}{dz^2} - qFz + V(x) \right) \phi(x) = E\phi(x) \quad (14)$$

其中 $V(x)$ 取(4)式所示形式, 将 H_s 按上节(11)式表示。我们首先用级数展开法求解 H_{s_0} 的本征态, 然后求 H'_s 相应的微扰修正。取坐标原点位于阱中心, 则 $H_{s_0} \phi(x) = E_0 \phi(x)$ 在不同区有如下的具体形式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_s} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 + \frac{qFL}{2} \right) \phi_I(x) = E_0 \phi_I(x) \quad \text{I} \left(z \leq -\frac{L}{2} \right) \quad (15)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_s} \frac{d^2}{dz^2} + V_m(x) - qFz \right) \phi_{II}(x) = E_0 \phi_{II}(x) \quad \text{II} \left(|z| < \frac{L}{2} \right) \quad (16)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_s} \frac{d^2}{dz^2} + V_0 - \frac{qFL}{2} \right) \phi_{III}(x) = E_0 \phi_{III}(x) \quad \text{III} \left(z \geq \frac{L}{2} \right) \quad (17)$$

其中

$$V_m(x) = \begin{cases} 0 & \text{方位阱} \\ \frac{2^m V_0}{L^m} x^m & \text{非方位阱 } (m = 2, 4, 6, \dots) \end{cases} \quad (18)$$

在 $z < -\frac{L}{2}$ 的 I 区和 $z > \frac{L}{2}$ 的 III 区, 由(15)和(17)可得满足边界条件的解分别为

$$\begin{aligned} \phi_I(x) &= Ae^{K_1 z} \\ \phi_{III}(x) &= De^{-K_3 z} \end{aligned} \quad (19)$$

其中 A 和 D 为待定常数, K_1 和 K_3 分别为

$$K_1 = \frac{1}{\hbar} \left[2m_x \left(V_0 + \frac{qFL}{2} - E_0 \right) \right]^{1/2} \quad (20)$$

$$K_3 = \frac{1}{\hbar} \left[2m_x \left(V_0 - \frac{qFL}{2} - E_0 \right) \right]^{1/2} \quad (21)$$

在 $|z| < \frac{L}{2}$ 的 II 区, 采用级数解法^[14]可得如下解

$$\phi_{II}(z) = B \sum_{l=0}^{\infty} a_l z^l + C \sum_{l=0}^{\infty} b_l z^l \quad (22)$$

其中 B 和 C 为待定常数, a_l 和 b_l 有如下递推关系确定

$$\begin{aligned} a_l &= -(fa_{l-1} + \varepsilon_x a_{l-2}) / l(l-1) \\ b_l &= -(fb_{l-1} + \varepsilon_x b_{l-2}) / l(l-1) \end{aligned} \quad (l < m+2) \quad (23)$$

和

$$\begin{aligned} a_l &= [V_m a_{l-m-2} - (fa_{l-1} + \varepsilon_x a_{l-2})] / l(l-1) \\ b_l &= [V_m b_{l-m-2} - (fb_{l-1} + \varepsilon_x b_{l-2})] / l(l-1) \end{aligned} \quad (l \geq m+2) \quad (24)$$

其中

$$a_0 = 1, \quad a_1 = 0, \quad a_2 = -\frac{\varepsilon_x}{2} \quad (25)$$

$$b_0 = 0, \quad b_1 = 1, \quad b_2 = 0 \quad (26)$$

和

$$f = \frac{2m_x qF}{\hbar^2}, \quad \varepsilon_x = \frac{2m_x E_0}{\hbar^2}, \quad V_m = \frac{2^{m+1} m_x V_0}{\hbar^2 L^m} \quad (27)$$

对方位阱可取(23)、(25)和(26)式(认为 $m = \infty$)。利用波函数及其导数在 $z = -\frac{L}{2}$ 和 $z = \frac{L}{2}$ 处的衔接条件可得本征能 E_{0n} 满足如下方程

$$u(E_{0n}) = \begin{vmatrix} 1 & w_{12} & w_{13} & 0 \\ K_1 & w_{22} & w_{23} & 0 \\ 0 & w_{32} & w_{33} & 1 \\ 0 & w_{42} & w_{43} & -K_3 \end{vmatrix} = 0 \quad (28)$$

其中

$$\begin{aligned}
 \omega_{12} &= \sum_{l=0}^{\infty} a_l \left(-\frac{L}{2}\right)^l, & \omega_{13} &= \sum_{l=0}^{\infty} b_l \left(-\frac{L}{2}\right)^l \\
 \omega_{22} &= \sum_{l=1}^{\infty} a_l l \left(-\frac{L}{2}\right)^{l-1}, & \omega_{23} &= \sum_{l=1}^{\infty} b_l l \left(-\frac{L}{2}\right)^{l-1} \\
 \omega_{32} &= \sum_{l=0}^{\infty} a_l \left(\frac{L}{2}\right)^l, & \omega_{33} &= \sum_{l=0}^{\infty} b_l \left(\frac{L}{2}\right)^l \\
 \omega_{42} &= \sum_{l=1}^{\infty} a_l l \left(\frac{L}{2}\right)^{l-1}, & \omega_{43} &= \sum_{l=1}^{\infty} b_l l \left(\frac{L}{2}\right)^{l-1}
 \end{aligned} \tag{29}$$

借助计算机,我们可找出相应的分立能级和波函数.从数值计算角度来讲,取足够多项和保证计算中的有效位数是求得精确能级值的必要条件,达到这一点是没有什么困难的.

在 H_{00} 的能级和相应的归一波函数求得之后,我们取准束缚态近似下的一级和二级微扰能为

$$E_i^{(1)} = \langle \phi_i | H'_z | \phi_i \rangle \tag{30}$$

$$E_i^{(2)} = \sum_n' \frac{|\langle \phi_i | H'_z | \phi_n \rangle|^2}{E_{0i} - E_{0n}} \tag{31}$$

和一级微扰波函数为

$$\phi_i^{(1)} = \sum_n' \frac{\langle \phi_n | H'_z | \phi_i \rangle}{E_{0i} - E_{0n}} \phi_n \tag{32}$$

其中 ϕ_n 为相应的准束缚态和

$$\langle \phi_n | H'_z | \phi_i \rangle = \langle \phi_{1n} | -qF \left(z + \frac{L}{2}\right) | \phi_{1i} \rangle + \langle \phi_{111n} | -qF \left(z - \frac{L}{2}\right) | \phi_{111i} \rangle \tag{33}$$

基于上述所求电子和空穴在 z 方向的归一化波函数 $\phi_{1e}(z_e)$ 和 $\phi_{1h}(z_h)$,按(7)式所示激子变分波函数形式对 α 进行变分,我们可求得相应第 l_e 电子和第 l_h 空穴子带的准二维 $1s$ 激子态能量

$$E_{1s}(l_e, l_h) = \min_{\alpha} \langle \Phi | H | \Phi \rangle = E_{0l_e} + E_{0l_h} + E_B(l_e, l_h) \tag{34}$$

其中 E_{0l_e} 和 E_{0l_h} 分别为第 l_e 电子和第 l_h 空穴子能级, $E_B(l_e, l_h)$ 为准束缚态下的激子结合能,它由下式确定

$$E_B(l_e, l_h) = E_{Ker}^{(l_e, l_h)} + E_{Per}^{(l_e, l_h)} \tag{35}$$

其中 $E_{Ker}^{(l_e, l_h)}$ 为第 l_e 电子、第 l_h 空穴在 xy 平面内相对运动的动能即

$$E_{Ker}^{(l_e, l_h)} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} \tag{36}$$

很明显对准二维激子来说电子-空穴相对运动动能与它们所处的子能级无关. $E_{Per}^{(l_e, l_h)}$ 为第 l_e 电子和第 l_h 空穴相对运动的库仑势能即

$$E_{Per}^{(l_e, l_h)} = \left\langle \Phi \left| -\frac{e^2}{sr} \right| \Phi \right\rangle \tag{37}$$

当然 $E_{P\sigma}^{(l_c, l_h)}$ 还依赖于变分参数 α 。由于电子-空穴库仑势与 ρ 和 $(z_c - z_h)$ 有关, 所以, 我们不能将波函数 Φ 中 $\psi_{l_c}(z_c)$ 、 $\psi_{l_h}(z_h)$ 以及 $\phi_{l_c}(\rho, \alpha)$ 分开以便直接积分出。但是, 我们可以部分解析积分出, 部分利用数值积分求得 $E_{P\sigma}^{(l_c, l_h)}$ 。将(7)式代入(37)式, 对 ρ 积分可得

$$\begin{aligned} E_{P\sigma}^{(l_c, l_h)} &= -\frac{4e^2\alpha^2}{\epsilon} \iiint \psi_{l_c}^2(z_c)\psi_{l_h}^2(z_h) \frac{\rho e^{-2\alpha\rho} d\rho}{[\rho^2 + (z_c - z_h)^2]^{3/2}} dz_c dz_h \\ &= -\frac{2e^2\alpha}{\epsilon} \iint \psi_{l_c}^2(z_c)\psi_{l_h}^2(z_h) P[\alpha(z_c - z_h)] dz_c dz_h \end{aligned} \quad (38)$$

其中

$$\begin{aligned} P[\alpha(z_c - z_h)] &= 2\alpha \int_0^\infty \frac{\rho e^{-2\alpha\rho}}{\sqrt{\rho^2 + (z_c - z_h)^2}} d\rho \\ &= 2\alpha |z_c - z_h| \left\{ \frac{\pi}{2} [H_1(2\alpha|z_c - z_h|) - N_1(2\alpha|z_c - z_h|)] - 1 \right\} \end{aligned} \quad (39)$$

H_1 为一阶 Struve 函数, 而 N_1 为一阶 Neuman 函数(第二类一阶 Bessel 函数)^[10]。按(39)式, 我们可作表将 $P[\alpha(z_c - z_h)]$ 存于计算机内, 这样我们可在 α 给定条件下, 采用二重数值积分计算 $E_{P\sigma}(l_c, l_h)$ 。值得指出, 由于我们不是采用电场作用下具有有效阱宽的无穷深阱解, 而由级数法求解(12)式所示哈密顿量相应的薛定谔方程得 z 方向的电子和空穴波函数, 这样可得到更为合理的 $E_B(l_c, l_h)$ 及其随电场的变化。

由电场作用而引起激子能量(峰)的移动可由下式决定:

$$\Delta E_{11}(l_c, l_h) = E_{11}(l_c, l_h) - E_{11}(l_c, l_h)_{F=0} \quad (40)$$

利用计算所得归一 $\psi_{l_c}(z_c)$ 和 $\psi_{l_h}(z_h)$, 我们还可计算与振子强度密切有关的电子-空穴重叠函数

$$I(l_c, l_h) = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{l_c}(z) \psi_{l_h}(z) \right|^2 \quad (41)$$

四、计算结果和讨论

按目前多数人所采用的有效质量和能隙参数^[3,5,8], 对轻和重空穴取 m_{zc} 、 m_{zh} 、 μ 分别为 $0.067m_0$ 、 $0.12m_0$ 、 $0.05m_0$ 和 $0.067m_0$ 、 $0.34m_0$ 、 $0.04m_0$ (m_0 为自由电子质量), 导带占能隙不连续性的比 $R_c = 0.6$, 即对空穴和电子取(4)式中 V_0 (对方位阱相应 GaAs/Ga_{0.66}Al_{0.34}As) 分别为 174.2meV 和 261.3meV 。我们计算(4)式所示 GaAs/GaAlAs 量子阱的子带和激子结合能以及重叠函数随电场的变化, 为后面与实验结果进行比较, 我们取阱宽 $L = 105 \text{ \AA}$, 电场变化范围为 0 至 $1.2 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 。

不同形状量子阱中的重空穴 $l_h = 1, 2$ 和 3 子带能量随电场的变化如图 2 所示。由图可清楚看出, 不同形状不同子带的变化规律很不相同。有限方位阱子带能随电场的变化趋势基本上与无穷方位阱相同。但是, 随电场增加, 数值上的差别也随之增加, 这对低能子带尤为显著。对抛物形位阱 ($m = 2$), $l_h = 1$ 和 2 子带能的变化基本上相同。在零

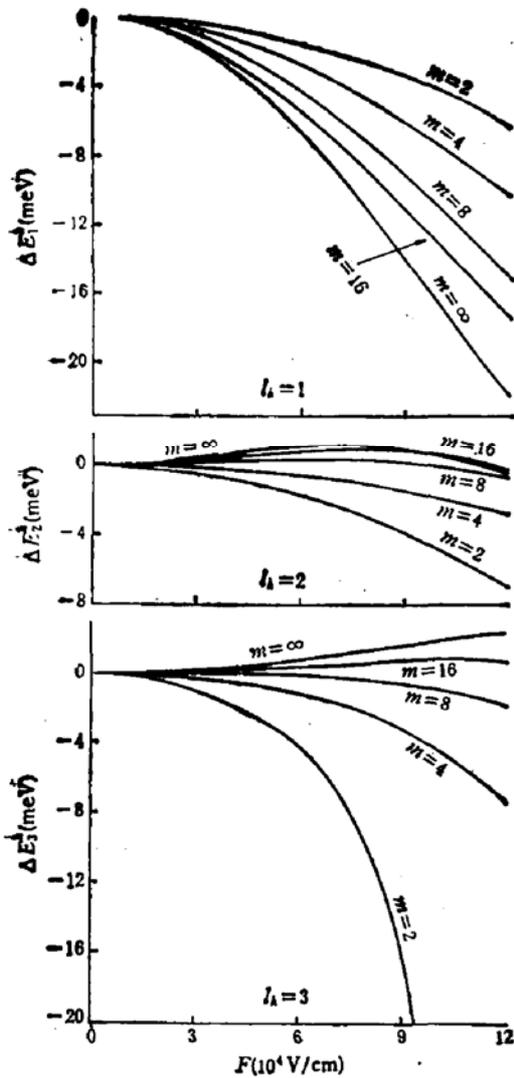


图 2 各种势阱 ($m = 2, 4, 8, 16, \infty$) F , 重空穴子带 ($l_h = 1, 2, 3$) 能移随电场的变化

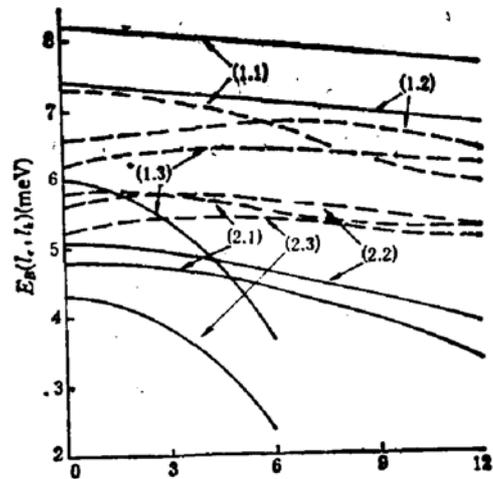


图 3 抛物形势阱(实线: —)和方位阱(虚线: ---)下,重空穴激子结合能随电场变化的比较

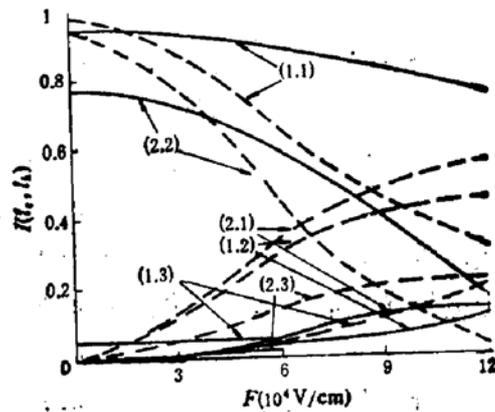


图 4 抛物形势阱(实线: —)和方位阱(虚线: ---)下,电子-重空穴重叠函数随电场变化的比较

场下 $l_h = 1$ 和 2 的子带能分别为 26.60 和 79.66 (meV), 它们与垒高 174.2 meV 相差很多, 所以与无穷抛物线阱计算结果基本一致. 为此我们可将(3)式看作电场下具有谐振频率 $\omega = \sqrt{\frac{8V_0}{L^2 m_{hh}}}$ 的谐振子哈密顿量. 若将电场作微扰处理, 则可得一级微扰能为零, 而二级微扰能为

$$E_{l_h}^{(2)} = \frac{\hbar e^2 F^2}{2m_{hh}\omega} \left[-\frac{l_h + 1}{\hbar\omega} + \frac{l_h}{\hbar\omega} \right] = -\frac{e^2 F^2 L^2}{16V_0} \quad (42)$$

它与 l_h 无关, 这正是 $l_h = 1$ 和 2 子带能在上述电场下的变化基本相同的原因. 将 $F = 1.2 \times 10^5$ V/cm 代入(42)式可得 $E_{l_h}^{(2)}$ 为 -5.70 meV 与图 2 所示有限抛物形势阱 $l_h = 1$ 和 2 子带能变化的 -6.00 meV 和 -6.90 meV 相差分别为 0.3 meV 和 1.2 meV, 这比较合理. 至于其他形状的有限位阱 ($m = 4, 6, 8, 16$) 电场下子带能变化规律介于有限抛物阱和方位阱之间就比较容易理解了. 值得指出, 在电场为 1.2×10^5 V/cm 时, 虽然 $m = 16$ 的有限位阱和方位阱相应的 $l_h = 2$ 和 $l_h = 3$ 子带能变化差别不大, 但对这两种形式阱 $l_h = 1$ 子带能变化之差仍可达较大值(约为 4 meV). 这一点对于后面解释实验结果是极为有用的.

显然上述子带能随阱形状和电场的不同变化反映了相应波函数的不同变化, 它们会在激子结合能、重叠函数以及激子峰能移上反映出来. 图 3 和图 4 为有限抛物和方位阱中不同子带相应重空穴激子结合能和重叠函数随电场的变化. 由图 3 可知, 由于抛物阱不同于 m 较大的位阱和方位阱, 抛物阱 $l_s = 3$ 子带能非常接近电场和量子阱合成的垒高, 电子-空穴分离较大, 所相应的激子(1,3)和(2,3)的结合能随电场变化较大. 虽然抛物阱 $l_s = 3$ 的空穴态在阱外的几率较大, 稳定态近似描述的可靠性随之下降, 但我们还是可以从图中看出变化趋势. 对于图 3 中所示抛物阱的其他子带相应的激子结合能变化均小于 1meV . 对有限方位阱来说, 除重空穴激子(1,1)结合能变化可大于 1meV 外, 其余均小于 1meV . 应该指出不同于无穷位阱零场下激子结合能计算结果^[2], $E_b(1,2)$ 与 $E_b(2,1)$ 不相等, 且 $E_b(1,2)$ 大于 $E_b(2,1)$. 由图 4 可知, 抛物阱和方位阱中的重叠函数在电场为零时 $I(1,1)$ 和 $I(2,2)$ 不为零, 而 $I(1,2)$ 、 $I(1,3)$ 、 $I(2,1)$ 和 $I(2,3)$ 趋于零. $I(1,1)$ 和 $I(2,2)$ 随电场增加而减少, $I(1,2)$ 、 $I(1,3)$ 、 $I(2,1)$ 和 $I(2,3)$ 随电场增加而增大. 这从构成激子的电子和空穴在电场中分别向相反方向运动是很好理解的. 由于电场作用, 原来几乎完全重叠的相同序号的电子和空穴可以分开, 从而使重叠函数减小, 相反, 原来几乎正交的电子和空穴在电场作用下, 可以变得不正交而使重叠函数增大. 由于二阱形状不同以及加电场后, 除阱底中心移动外, 抛物阱阱底形状不变(见图 1), 而方位阱阱底形状变化很大, 使得二阱中电子和空穴波函数的相对变化很不相同以致重叠函数随电场变化极不相同. 由图 4 可看出在电场为 $1.2 \times 10^5\text{V/cm}$ 时, 方位阱的 $I(1,2)$ 、 $I(1,3)$ 、 $I(2,1)$ 和 $I(2,3)$ 值比抛物阱的相应值大得多.

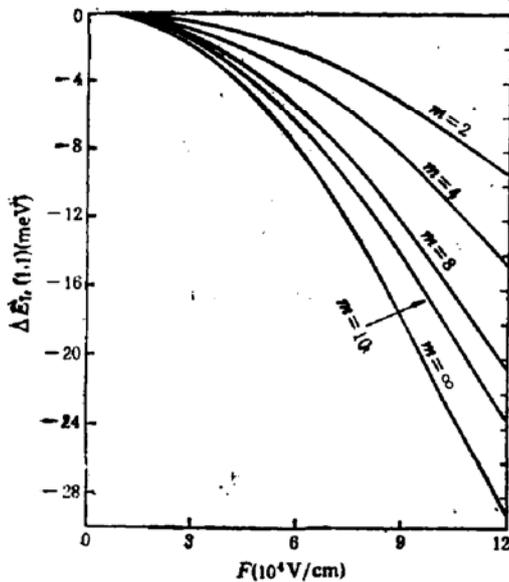


图 5 各种阱 ($m = 2, 4, 8, 10, \infty$) 下, 重空穴(1,1) 激子峰能移随电场的变化

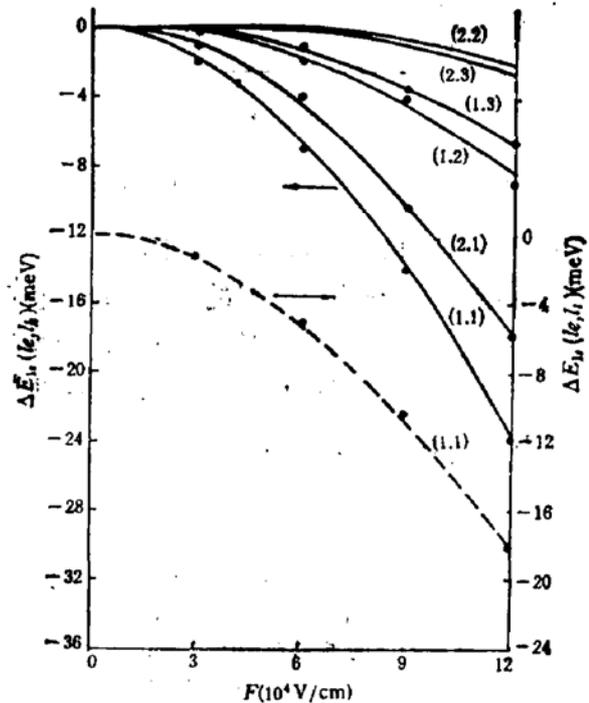


图 6 $m = 10$ 的势阱下, 轻(虚线: ---)、重(实线: —)空穴激子峰能移随电场变化的计算值与 K. Yamanka 等的实验值(图中为●)的比较

图 5 为不同阱形状 ($m = 2, 4, 8, 10, \infty$) 重空穴激子(1,1)在电场下的能移. 由图可

知,随着指数 m 减小,能移值减小. 这由指数 m 减小有效阱宽减小不难理解. 在电场 $F = 1.2 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 时,不同形状阱中重空穴激子(1,1)的能移值相差相当可观. 我们认为实际(实验测量用)样品由于制备工艺问题以及可能存在的界面能带弯曲的渐变特征在 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 界面可存在一至二个原子层(GaAs 晶格常数为 5.6389 \AA)的势变化过渡区,使量子阱偏离方位阱形式,所以为在较大电场范围内使理论计算与实验测量激子能移相符,在理论计算中必须考虑这种非方位阱效应. 我们按上述参数,取(4)式所示 $m = 10$ 的有限位阱和方位阱,同时计算这二种不同阱中的各激子峰(包括轻空穴(1,1)激子峰)在电场下的能移,发现 $m = 10$ 的有限位阱与 K. Yamanaka 等人^[5]的由光电流谱所得各激子峰能移值不仅变化趋势相符,而且数值上也符合得很好(见图6),而对方位阱中的轻和重空穴激子(1,1),在电场为 $1.2 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 时,计算值可比实验能移值大 $5 \sim 6 \text{ meV}$ 左右. 对较高子带相应的重空穴激子峰(2,2)和(2,3)二阱形式的变化趋势也不相同,与 K. Yamanaka 等人^[5]实验曲线仔细对比可发现 $m = 10$ 这种有限位阱与实验更加符合. 由上述各激子峰能移的全面比较,我们认为在 $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 界面处能带弯曲存在一至二个原子层的过渡区假设是合理的(见图1).

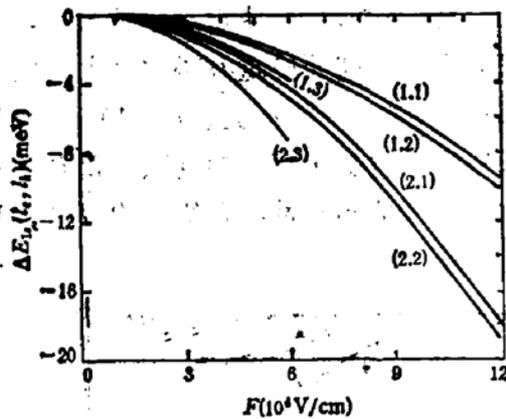


图7 抛物形势阱下,重空穴激子峰能移随电场的变化

这在有关理论分析中应加以考虑. 为对不同位阱形状激子峰能移变化有一个较为完整的图象,我们在图7中给出有限抛物位阱各重空穴激子峰在电场下的能移值,由图可清楚看出与方位阱不同,(2,2)峰变化大于(1,1)峰. 综上所述,在有效质量近似和准束缚态近似成立条件下,由于激子结合能随电场变化较小,为正确得到激子峰能移,除选取合适的有效质量和带隙参数外,关键所在是正确选取量子阱形式和精确求解子带能移. 在本文所取的激子模型下,取 $m = 10$ 的有限位阱,计算的激子峰能移与电场的关系和实验符合得很好. 最后值得指出,为正确预测量子阱中的空穴子带和振子强度等物理量,考虑轻重空穴的混合效应是很有必要的^[15]. 我们认为基于轻重空穴混合的激子模型,进一步深入研究势阱形状对电场下量子阱中的子带和激子的影响是很有意义的.

参 考 文 献

- [1] G. D. Sanders and K. K. Bajaj, *Phys. Rev.*, **B35**, 2308(1987) 及其所引参考文献.
- [2] M. Matsuura and T. Kamizato, *Phys. Rev.*, **B33**, 8385(1986).
- [3] 夏建白、黄昆, *物理学报*, **37**, 1(1988).
- [4] D. A. Broide and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **B34**, 3917(1986).
- [5] K. Yamanaka, T. Fukunaga, N. Tsukada, K. L. I. Kobayashi and M. Ishii, *Appl. Phys. Lett.*, **48**, 840(1986).
- [6] Y. Masumoto, S. Taruoha and H. Okamoto, *Phys. Rev.*, **B33**, 5961(1986).
- [7] H. Iwamura, T. Saku and H. Okamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **24**, 104(1985).
- [8] P. W. Yu, G. D. Sanders, D. C. Reynolds, K. K. Bajaj, C. W. Litton, J. Klem, D. Huang and H. Morkoo, *Phys. Rev.*, **B35**, 9250(1987).
- [9] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, *Phys. Rev.*, **B28**, 3241(1983).

- [10] D. A. B. Miller et al. *Phys. Rev.*, **B32**, 1043(1985).
[11] R. L. Greene, K. K. Bajaj and D. E. Phelps, *Phys. Rev.*, **B29**, 1807(1984).
[12] J. M. Luttinger and Kohn, *Phys. Rev.*, **102**, 1030(1956).
[13] B. Zaslav and M. E. Zandier *Amer. J. Phys.*, **35**, 1118(1967).
[14] 可参考数理方法中线性常微分方程的级数解法部分, 例: 郭敦仁编数学物理方法 166(1965).
[15] B. F. Zhu and K. Huang, *Phys. Rev.*, **B36**, 8102(1987).

Effects of Well Shapes on Energy Shifts of Subbands and Excitons in Quantum Wells in an Electric Field

Zhu Jialin, Tang Daohua, Gu Binglin and Xiong Jiajiong

(Department of Physics, Qinghua University, Beijing)

Abstract

Under the bound-state approximation, subbands of electrons and holes in GaAs/GaAlAs quantum wells with different shapes in an electric field are solved by using the method of series expansion. Then, variational method is used to obtain the binding energies of excitons. Based on these, we have for the first time obtained the variational picture of the energy shifts of subbands and excitons from a parabolic to square well. Considering the effect of the shape of GaAs/GaAlAs quantum well, calculated results agree well with experiments.

KEY WORDS: Quantum well, Exciton, GaAs/GaAlAs