

# 非对称耦合双量子阱中的激子态及结合能

杨双波

(南京师范大学物理科学与技术学院,江苏省大规模复杂系统数值模拟省重点实验室,江苏南京 210023)

[摘要] 本文在有效质量近似下,利用变分法计算了  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  非对称耦合双量子阱系统中重/轻空穴激子态的结合能,研究了重/轻空穴激子态的结合能随右阱宽的变化关系;计算了在重/轻空穴激子态下电子与重/轻空穴沿  $z$  方向的平均距离及在垂直于  $z$  轴的平面内的平均距离,研究了它们随右阱宽的变化关系;计算了给定激子态下电子与重/轻空穴在空间各区域的分布几率,研究了空间各区域分布几率随右阱宽变化的关系.计算中考虑了电子与重/轻空穴在势阱与势垒中具有不同的有效质量,计算结果合理,令人信服.

[关键词] 量子阱,激子结合能,有效质量近似,重/轻空穴

[中图分类号]O413.1 [文献标志码]A [文章编号]1001-4616(2016)03-0046-08

## Exciton State and Its Binding Energy for a Coupled Asymmetric Double Quantum Well System

Yang Shuangbo

(Jiangsu Key Laboratory for NSLSCS, School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

**Abstract:** Within effective mass approximation, and by variational method we calculated the binding energies for the heavy hole exciton and light hole exciton for a coupled asymmetric double quantum well system, we studied how the binding energies change with the increase of the width of the right potential well; at a given exciton state, we calculated the expectation value of the distance in  $z$  direction and the distance in the plane perpendicular to  $z$  axis between electron and the hole(H/L); we studied the behavior of the change of the distances as we increase the width of the right potential well; at a given exciton state, we calculated the probability distribution in space region for the electron and hole (H/L) pair appeared, we studied how the probability changes with increasing the width of the right potential well. The results are reasonable and very convincing.

**Key words:** quantum well, binding energy of exciton, effective mass approximation, heavy/light hole

激子是固体中的一种激发态,是导带中的电子与价带中的空穴依靠库仑相互作用形成的束缚态,类似于氢原子系统.量子阱中的激子由于受到势垒的限制作用其性质与体材料中的激子有很大不同,如不同的结合能、不同的有效玻尔半径等.自从分子束外延技术和金属氧化物有机化学沉积技术发展以来,量子阱中的激子效应从理论和实验上得到了广泛研究<sup>[1-6]</sup>.人们利用量子阱结构可以改变激子的性质,如量子受限斯塔克效应和激子的饱和吸收及非线性效应等,制成了自电光器件、高速高频低损耗的激子形光学双稳器件、及低阈值电流密度高调制度的量子阱激光器等.最近 Cruze H<sup>[7]</sup>研究了耦合双量子阱中间接激子动力学,发现电荷可以动力学地局域在单个量子阱或双量子阱中;Thomas K Baldwin 等人<sup>[8]</sup>实验研究了混合型 GaAs 量子阱中激子关联空穴的隧穿,发现隧穿过程敏感依赖宽窄量子阱中价带的能级结构;Cen J, Chen R, Bajaj K K 等<sup>[9]</sup>研究了磁场中介电量子阱中激子的结合能,考虑了像电荷的影响;Arulmozhi M, Anitha A 等<sup>[10]</sup>研究了单表面量子阱中的激子态.除了量子阱结构外,人们在量子点结构<sup>[11-14]</sup>、单层碳纳米管结构<sup>[15-18]</sup>及其有外电磁场<sup>[19-20]</sup>下研究了激子态及其光学性质.

收稿日期:2015-10-19.

通讯联系人:杨双波,博士,教授,研究方向:低维量子系统. E-mail: yangshuangbo@njnu.edu.cn

在这篇文章中,我们从有效质量近似出发,考虑了电子与重/轻空穴在势阱与势垒中具有不同的有效质量,用变分法计算了非对称耦合的双量子阱中重/轻空穴激子态及其结合能,研究了在左阱宽固定情况下,结合能与右势阱宽度的关系;在给定激子态下计算了电子与空穴在  $z$  方向及垂直于  $z$  方向的  $xy$  平面内的平均距离,即激子的“大小”,研究了它们如何随右阱宽度变化的关系;在给定的激子态下,计算了电子与空穴在空间区域的分布几率,研究了空间分布几率随右阱宽变化的关系,即激子的局域性.

基于量子阱结构中二维激子能级跃迁的光吸收与光发射研究是一个倍受关注的研究方向,量子阱具有一维压缩的态密度,势阱中具有量子化的能级和量子受限的二维激子,因此对量子阱的光学性质的研究,对新一代量子阱光电子器件如量子阱太阳能电池等的制作具有重要意义.由于量子阱太阳能电池中阱层厚度和组分可以灵活地调节,因此可以获得最佳带隙能量,以满足太阳能电池对不同波长光的吸收.同时,多量子阱结构还可以最大限度地减小光生载流子从量子阱逃逸.本文研究的半导体非对称耦合的双量子阱结构也是双量子阱单光子探测器<sup>[21]</sup>的理论模型,研究结果对单光子探测器的研发具有重要的参考价值.与对称耦合的双量子阱结构比较,非对称耦合的双量子阱结构在光电子器件的设计制作上具有较高的灵活操作性.

## 1 理论与模型

在  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  构成的非对称双量子阱中,如图 1 所示,量子阱的宽度不同,左阱宽为  $L_{w1}$ ,右阱宽为  $L_{w2}$ ,中间  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  势垒层宽为  $L_b$ .在有效质量近似下双势阱系统中具有重(轻)空穴带激子的哈密顿量在柱坐标下可表示为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\pm}} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{\pm}} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_{ew}(z_e) + V_{hw}(z_h), \quad (1)$$

其中  $m_e$  是电子的有效质量,  $\varepsilon$  为静态介电常数,  $m_{\pm}$  是重(+)/轻(-)空穴沿  $z$  方向的质量;  $\mu_{\pm}$  是对应于重(+)/轻(-)空穴在垂直  $z$  轴的平面内的约化质量.  $\mu_{\pm}$  和  $m_{\pm}$  可用 Kohn-Luttinger 带参数  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  表示为

$$\frac{1}{\mu_{\pm}} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_0} (\gamma_1 \pm \gamma_2), \quad (2)$$

$$\frac{1}{m_{\pm}} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 \mp 2\gamma_2), \quad (3)$$

这里  $m_0$  是自由电子的质量.在方程(2)与(3)中,“+”对应重空穴,而“-”对应轻空穴.  $\mathbf{r}_e$  与  $\mathbf{r}_h$  是电子和空穴的空间位置矢量,  $\rho, \varphi, z$  是相对电子空穴的坐标.在上面的公式中,有效质量  $\mu_{\pm}, m_e, m_{\pm}$  在势阱和势垒中是不同的.介电常数  $\varepsilon$  被取为势阱与势垒介电常数的平均值,借此可忽略像电荷的贡献.势阱  $V_{ew}, V_{hw}$  被取为宽度不同的双方势阱的势, i.e.

$$V_{iw}(z_i) = \begin{cases} V_i, & z_i < -L_{w1} - L_b/2, \\ 0, & -L_{w1} - L_b/2 \leq z_i < -L_b/2, \\ V_i, & -L_b/2 \leq z_i < L_b/2, \\ 0, & L_b/2 \leq z_i < L_b/2 + L_{w2}, \\ V_i, & z_i > L_b/2 + L_{w2}, \end{cases} \quad (4)$$

这里  $i=e, h$ .  $z_e$  和  $z_h$  的原点已被取在中间势垒的中心.势垒高  $V_e$  及  $V_h$  依赖于  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  中 Al 组份的浓度  $x$ , 如总带隙为  $\Delta E_g = 1.155x + 0.37x^2$ , 则  $V_e = 0.60\Delta E_g$ ,  $V_h = 0.40\Delta E_g$ . Kohn-Luttinger 带参数对 GaAs、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  等材料采用文献上报道的结果,如对  $x=0.3$ , 即  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$  有  $\gamma_1 = 6.98(\text{GaAs})/6.01(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})$ ,  $\gamma_2 = 2.06(\text{GaAs})/1.69(\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As})$ .

利用变分法计算基态激子的结合能,设试探波函数为

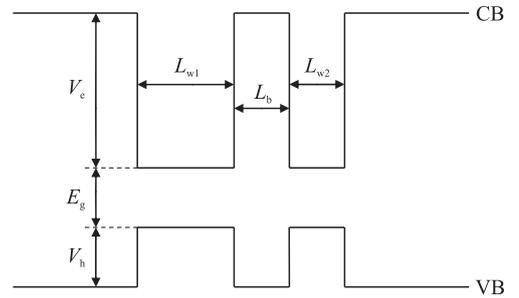


图1 非对称双量子阱能带结构示意图  
Fig.1 The sketch of the energy band structure for the asymmetric double quantum well system

$$\psi = f_e(z_e)f_h(z_h)g(\rho, z, \varphi). \tag{5}$$

函数  $f_e(z_e)$  或  $f_h(z_h)$  为一维有限深双量子阱的基态, 满足如下薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{dz_i^2} f_i(z_i) + V_{iw}(z_i) f_i(z_i) = E_i f_i(z_i), \quad i = e, h, \tag{6}$$

其解可表示为

$$f_i(z_i) = \begin{cases} A_1 \cosh k_b z_i + B_1 \sinh k_b z_i, & (z_i \leq -L_{w1} - L_b/2), \\ A_2 \cos k_w z_i + B_2 \sin k_w z_i, & (-L_{w1} - L_b/2 \leq z_i < -L_b/2), \\ A_3 \cosh k_b z_i + B_3 \sinh k_b z_i, & (-L_b/2 \leq z_i < L_b/2), \\ A_4 \cos k_w z_i + B_4 \sin k_w z_i, & (L_b/2 \leq z_i < L_b/2 + L_{w2}), \\ A_5 \cosh k_b z_i + B_5 \sinh k_b z_i, & (z_i > L_b/2 + L_{w2}), \end{cases} \tag{7}$$

$$k_b = \sqrt{2m_b(V_i - E_i)/\hbar^2}, \tag{8}$$

$$k_w = \sqrt{2m_w E_i/\hbar^2}, \tag{9}$$

其中  $i = e, h$ ,  $m_w$  和  $m_b$  为电子(或空穴)分别在 GaAs 和  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  中的质量. 系数  $A_1, A_2, \dots, A_5$ ,  $B_1, B_2, \dots, B_5$ , 及本征能量  $E_e, E_h$  等可从边界条件及界面连续性条件确定, 如在  $z_i \rightarrow \pm\infty$  时  $f_i = 0$ , 即束缚态条件, 在 GaAs 与  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  的分界面上  $f_i$  及  $(1/m_i)(df_i/dz_i)$  连续. 经计算得到决定非对称双量子阱束缚态能量的方程为

$$t_{11}(E_i) = \cos[k_w(L_{w1} + L_{w2})] \cosh(k_b L_b) + \frac{1}{2} \exp(k_b L_b) \left( \sqrt{\frac{m_w V_i - E_i}{m_b E_i}} - \sqrt{\frac{m_b E_i}{m_w V_i - E_i}} \right) \sin[k_w(L_{w1} + L_{w2})] + \frac{1}{2} \sinh(k_b L_b) \left\{ \left[ \frac{m_w}{m_b} \left( \frac{V_i - E_i}{E_i} \right) + \frac{m_b}{m_w} \left( \frac{E_i}{V_i - E_i} \right) \right] \sin(k_w L_{w1}) \sin(k_w L_{w2}) + 2 \cos(k_w L_{w1}) \cos(k_w L_{w2}) \right\} = 0, \quad i = e, h. \tag{10}$$

通过数值求解非线性方程(10)可得本征能量  $E_i$ , 其中,  $t_{11}(E_i)$  是传递矩阵  $T$  的矩阵元<sup>[22]</sup>.

设试探波函数中的函数  $g(\rho, z, \varphi)$  可取为

$$g(\rho, z, \varphi) = \rho^{|m|} e^{im\varphi} e^{-\sqrt{\rho^2 + z^2}/\lambda}, \tag{11}$$

这里  $\lambda$  为非线性变分参数,  $m\hbar$  为激子角动量的  $z$  分量,  $\rho = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2}$ ,  $z = z_e - z_h$ . 在下面的计算中我们取  $m = 0$  的情况, 这时哈密顿量(1)中的  $\partial^2/\partial\varphi^2$  项将消失,  $g$  将变为

$$g(\rho, z) = e^{-\sqrt{\rho^2 + z^2}/\lambda}, \tag{12}$$

类似氢原子的 1s 态波函数. 激子 1s 态的变分结合能  $E_b$  被定义为

$$E_b = E_e + E_h - \min \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \tag{13}$$

操作上, 令平均能量  $\bar{E}(\lambda) = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ , 计算  $d\bar{E}(\lambda)/d\lambda$ , 数值求解  $d\bar{E}(\lambda)/d\lambda = 0$ , 其根  $\lambda_c$  将使  $\bar{E}(\lambda_c)$  取到极值(通常为最小值), 则 1s 态激子的变分结合能为  $E_b = E_e + E_h - \bar{E}(\lambda_c)$ .

## 2 数值计算的结果

我们采用文献上报道的 GaAs 和  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  对  $x=0.3$  材料的 Kohn-Luttinger 带参数值, 及文献[23]上经常使用的电子在 GaAs 势阱和  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  势垒中的有效质量值分别为  $m_e = 0.07m_0$ ,  $m_b = 0.088m_0$ ,  $m_0$  为自由电子的质量, 通过计算得到重/轻空穴在 GaAs 的有效质量分别为  $m_{w+} = 0.431m_0$ ,  $m_{w-} = 0.0901m_0$ ,  $\mu_{w+} = 0.0428m_0$ ,  $\mu_{w-} = 0.052m_0$ ; 重/轻空穴在  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  中的有效质量分别为  $m_{b+} = 0.3802m_0$ ,  $m_{b-} = 0.1064m_0$ ,  $\mu_{b+} = 0.0525m_0$ ,  $\mu_{b-} = 0.0637m_0$ . 这里重空穴在  $xy$  平面内的有效质量较轻空穴的小, 即  $\mu_{i+} < \mu_{i-}$ , 其中  $i = w, b$ . 利用变分法计算激子的结合能时, 我们首先对  $\rho$  积分, 积分区间为  $(0, \infty)$ , 这个积分

可以得到解析结果,然后再对  $z_e, z_h$  在有限区间内积分,这个二维积分只能得到数值结果.

### 2.1 电子及重/轻空穴在双势阱中的波函数

对于上面有效质量参数的设置,我们分别计算了一维有限深双量子阱系统的电子波函数及重/轻空穴的波函数.计算了在左阱宽  $L_{w1}=70 \text{ \AA}$  固定,中间势垒宽  $L_b=30 \text{ \AA}$ ,右阱宽  $L_{w2}$  分别取几个不同值,如  $L_{w2}=70 \text{ \AA}, 60 \text{ \AA}, 50 \text{ \AA}, 30 \text{ \AA}$  等的电子波函数,及重/轻空穴的波函数,其结果示于图 2(a-c). 结果显示,当左阱宽大于右阱宽时,电子和空穴在左阱的几率幅大于在右阱中的几率幅,重空穴尤其如此.而且随着右阱宽度的增加,电子和重/轻空穴在左阱的几率幅减小,在右阱的几率幅增加,直到左右阱宽度相等时,电子和重/轻空穴的波函数达到对称分布.另一个值得一提的问题是,重空穴的波函数在右阱宽  $L_{w2} \leq 60 \text{ \AA}$  的范围内基本上是局域在左阱区,右阱区中几率幅很小,轻空穴的波函数的行为类似电子波函数的行为.这种差别来自于重/轻空穴有效质量的很大差异,重空穴在  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  中的有效质量是电子有效质量的 4.32 倍,而轻空穴在  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  中的有效质量是电子有效质量的 1.21 倍.重空穴因质量大而不容易穿过势垒到达右边势阱.

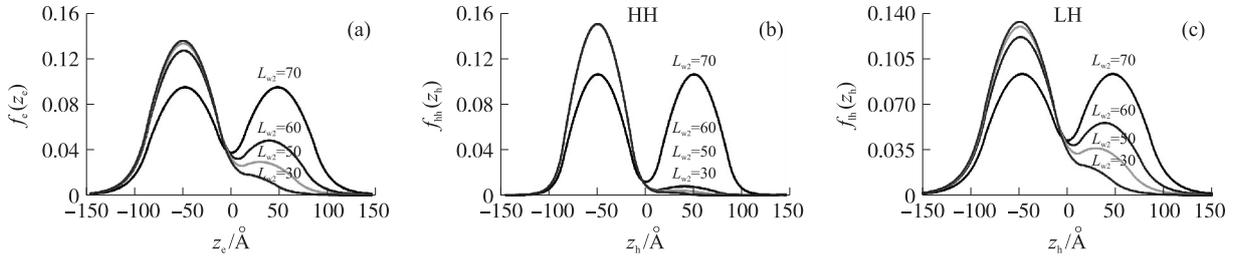


图2 双量子阱中电子和重/轻空穴的波函数:(a)电子的波函数;(b)重空穴的波函数;(c)轻空穴的波函数.已知左阱宽  $L_{w1}=70 \text{ \AA}$

Fig.2 The wave function of electron and that of heavy/light hole in double quantum well:(a) wave function of electron;(b) wave function of heavy hole;(c) wave function of light hole. Suppose the width of left well is  $L_{w1}=70 \text{ \AA}$  fixed, the width of the middle barrier is  $L_b=30 \text{ \AA}$

### 2.2 重/轻空穴激子的结合能与右阱宽的关系

对左阱宽  $L_{w1}=70 \text{ \AA}$ ,中间势垒宽  $L_b=30 \text{ \AA}$  及上面设置的有效质量参数,我们对右阱宽  $L_{w2}$  从  $5 \text{ \AA}$  到  $60 \text{ \AA}$  的范围内计算了重/轻空穴激子 1s 态的结合能,其结果示于图 3.首先看到轻空穴激子 1s 态的结合能大于重空穴激子 1s 态的结合能,这是因为重空穴在与  $z$  垂直的平面内的有效质量比轻空穴的小的缘故.还可以看出重/轻空穴激子的结合能随右阱宽度  $L_{w2}$  的增加逐渐减小.轻空穴激子 1s 态的结合能在  $5 \text{ \AA} \leq L_{w2} \leq 40 \text{ \AA}$  的范围内减小的速率较小,然后以更大的速率减小;重空穴激子 1s 态的结合能开始在一个比较大的范围内,如  $5 \text{ \AA} \leq L_{w2} \leq 47 \text{ \AA}$ ,以较小的速率减小,随后将以更大的速率减小.重空穴激子结合能随  $L_{w2}$  的增大而减小的速率小于轻空穴激子的减小速率是重空穴在  $z$  方向上有较大质量的体现.重/轻空穴激子 1s 态的结合能的相对大小在  $L_{w2}=54 \text{ \AA}$  处发生反转,即在  $54 \text{ \AA} \leq L_{w2} \leq 60 \text{ \AA}$  范围内重空穴激子 1s 态的结合能大于轻空穴激子的结合能,这表明在右势阱宽这个范围内重空穴的有效质量对激子结合能的贡献比轻空穴的大.

### 2.3 重/轻空穴激子的“大小”与右阱宽的关系

为了估计电子与重/轻空穴的相对距离,我们分别计算了在激子态  $\psi$  下在  $z$  方向及在垂直于  $z$  轴的平面内的平均距离,即

$$\langle \Delta z \rangle = \langle \psi | |z_e - z_h| | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle, \quad (14)$$

$$\langle \rho \rangle = \langle \psi | \sqrt{[(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2]^{1/2}} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \rho | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle. \quad (15)$$

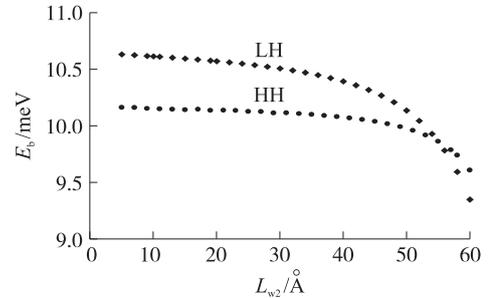


图3 重/轻空穴激子的结合能随右阱宽的变化

Fig.3 The variation of the binding energy for the heavy/light hole with the width of the right well

我们首先对  $\rho$  在  $(0, \infty)$  内积分, 得到解析结果后再对  $z_e, z_h$  在有限区间  $-L/2 \leq z_e \leq L/2, -L/2 \leq z_h \leq L/2$  内进行数值积分, 我们选取  $L=300 \text{ \AA}$ , 使得波函数在左右边势垒内部为零, 保证计算结果的准确性. 对右阱宽  $L_{w_2}$  为  $5 \text{ \AA}$  到  $60 \text{ \AA}$  的范围内计算了重/轻空穴激子的  $\langle \Delta z \rangle$  和  $\langle \rho \rangle$ , 其结果分别示于图 4(a) 和图 4(b). 可以看到对重/轻空穴激子而言,  $\langle \Delta z \rangle$  和  $\langle \rho \rangle$  随右阱宽  $L_{w_2}$  的增加而单调增加, 且重空穴激子在  $L_{w_2} \leq 47 \text{ \AA}$  时增加的速度较慢,  $L_{w_2} > 47 \text{ \AA}$  时增加的速度较快, 轻空穴激子在  $L_{w_2} \leq 40 \text{ \AA}$  时增加的速度缓慢,  $L_{w_2} > 40 \text{ \AA}$  时增加的速度较快, 与重轻激子结合能随  $L_{w_2}$  变化的情况类似. 另一个问题是轻空穴激子的  $\langle \Delta z \rangle$  大于重空穴激子的  $\langle \Delta z \rangle$ , 而轻空穴激子的  $\langle \rho \rangle$  却小于重空穴激子的  $\langle \rho \rangle$ , 这仍然是由于质量效应的结果. 轻空穴激子中空穴的质量在  $z$  方向小于重空穴的质量, 而在  $\rho$  方向大于重空穴的质量. 在  $L_{w_2}=60 \text{ \AA}$  处重/轻空穴与电子的距离在与  $z$  垂直的平面内几乎相等, 在  $z$  方向重空穴与电子的距离小于轻空穴与电子的距离, 所以重空穴激子的结合能大于轻空穴激子的结合能. 另一方面重/轻空穴激子的  $\langle \Delta z \rangle$  值基本上小于  $30 \text{ \AA}$ , 表明对右阱宽  $L_{w_2} \geq 22 \text{ \AA}$  的双势阱其电子与空穴是处在同一个势阱内的, 至于在哪个阱中在下一节讨论.

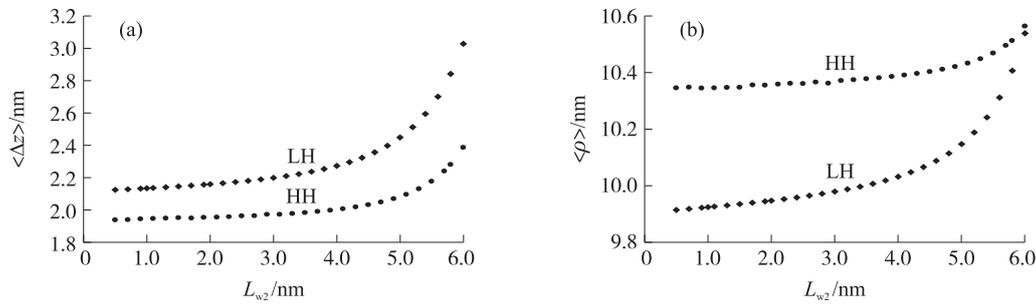


图4 重/轻空穴激子中电子与空穴之间沿  $z$  方向的平均距离及在  $xy$  平面内的平均距离随右阱宽的变化关系:

(a) 沿  $z$  方向的平均距离  $\langle \Delta z \rangle$ ; (b) 在  $xy$  平面内的平均距离  $\langle \rho \rangle$

Fig.4 The mean distances in  $z$  direction and in the plan perpendicular to  $z$  axis for electron and hole in the heavy/light hole excitons:

(a)  $\langle \Delta z \rangle$  in the  $z$  direction; (b)  $\langle \rho \rangle$  in the plan perpendicular to  $z$  axis

#### 2.4 重/轻空穴激子态中电子与空穴的位置分布

我们首先规定中间势垒为区域 1, 左势阱为区域 2, 右势阱为区域 3, 激子  $iejh$  表明电子在第  $i$  区域, 空穴在第  $j$  区域的激子, 其中  $i, j=1, 2, 3$ . 对于一给定的激子态  $\psi$ , 电子处于第  $i$  区, 空穴处于第  $j$  区的几率为

$$P_{ie,jh} = \frac{\int_0^\infty \rho d\rho \int_{\text{zone } i} dz_e \int_{\text{zone } j} dz_h \psi^* \psi}{\int_0^\infty \rho d\rho \int_{-L/2}^{L/2} dz_e \int_{-L/2}^{L/2} dz_h \psi^* \psi} \quad (16)$$

对重/轻空穴激子态, 我们计算了分布几率  $P_{ie,jh}$  随右阱宽  $L_{w_2}$  的变化关系, 结果分别如图 5(a-i) 和图 6(a-i) 所示. 在轻空穴激子态下, 电子和空穴都处在左势阱的几率在  $66\% \sim 82.5\%$  之间, 随右阱宽的增加而单调减小, 在右势阱宽最窄即  $L_{w_2}=5 \text{ \AA}$  处达到最大值  $82.5\%$ ; 电子处在左势阱, 空穴处在中间势垒内的几率在  $5.0\% \sim 7.0\%$  之间随右势阱宽增加而单调增加, 在  $L_{w_2}=60 \text{ \AA}$  处达到最大值  $7.0\%$ ; 电子处在左势阱空穴处在右势阱的几率在  $0 \sim 6.0\%$  之间, 随  $L_{w_2}$  增加而单调增加, 且在  $L_{w_2}=45 \text{ \AA}$  处几率只有  $2.0\%$ ,  $L_{w_2} > 45 \text{ \AA}$  后, 以较快的速度增加达到  $6.0\%$ ; 电子和空穴都处在中间势垒内部的几率很小, 只有  $0.4\% \sim 0.9\%$  之间, 随  $L_{w_2}$  的增加而单调增加; 电子处在中间势垒内, 空穴处在左势阱的几率在  $4.6\% \sim 5.6\%$  之间, 随  $L_{w_2}$  的增加单调增加; 电子处在中间势垒内, 空穴处在右势阱中的几率在  $0 \sim 1.2\%$ , 随  $L_{w_2}$  增加而单调增加, 在  $L_{w_2}=45 \text{ \AA}$  只有  $0.2\%$ , 然后随  $L_{w_2}$  以较快速度上升到  $1.2\%$ ; 电子处在右势阱空穴处在左势阱的几率在  $0 \sim 5.0\%$  之间, 随  $L_{w_2}$  增加而单调增加, 在  $L_{w_2}=45 \text{ \AA}$  处只有  $1.0\%$ , 然后较快速地增加到  $5.0\%$ ; 电子处在右阱空穴处在中间势垒的几率在  $0 \sim 1.0\%$  之间, 随  $L_{w_2}$  单调增加, 在  $L_{w_2}=45 \text{ \AA}$  时只有  $0.2\%$ , 然后以较快速度增加; 电子和空穴都在右势阱的几率在  $0 \sim 2.0\%$ , 且在  $L_{w_2} < 45 \text{ \AA}$  范围内几乎为零, 然后随  $L_{w_2}$  增加而单调上升到  $2.0\%$ . 重空穴激子态中电子和空穴都处在左势阱的几率在  $83\% \sim 89\%$  之间, 比轻空穴激子态中的几率高. 这种在几率

上大的差别,仍然是由于重空穴质量较大不容易隧穿造成的.随着右阱宽  $L_{w_2}$  的增加,轻空穴激子态的几率  $P_{2e,2h}$  单调递减,且在  $L_{w_2} \leq 40 \text{ \AA}$  的范围内减小得较慢,在  $L_{w_2} > 40 \text{ \AA}$  时减小加快,而重空穴激子态的分布几率  $P_{2e,2h}$  单调递减,且在  $L_{w_2} \leq 47 \text{ \AA}$  的范围内减小得较慢,在  $L_{w_2} > 47 \text{ \AA}$  时减小加快.

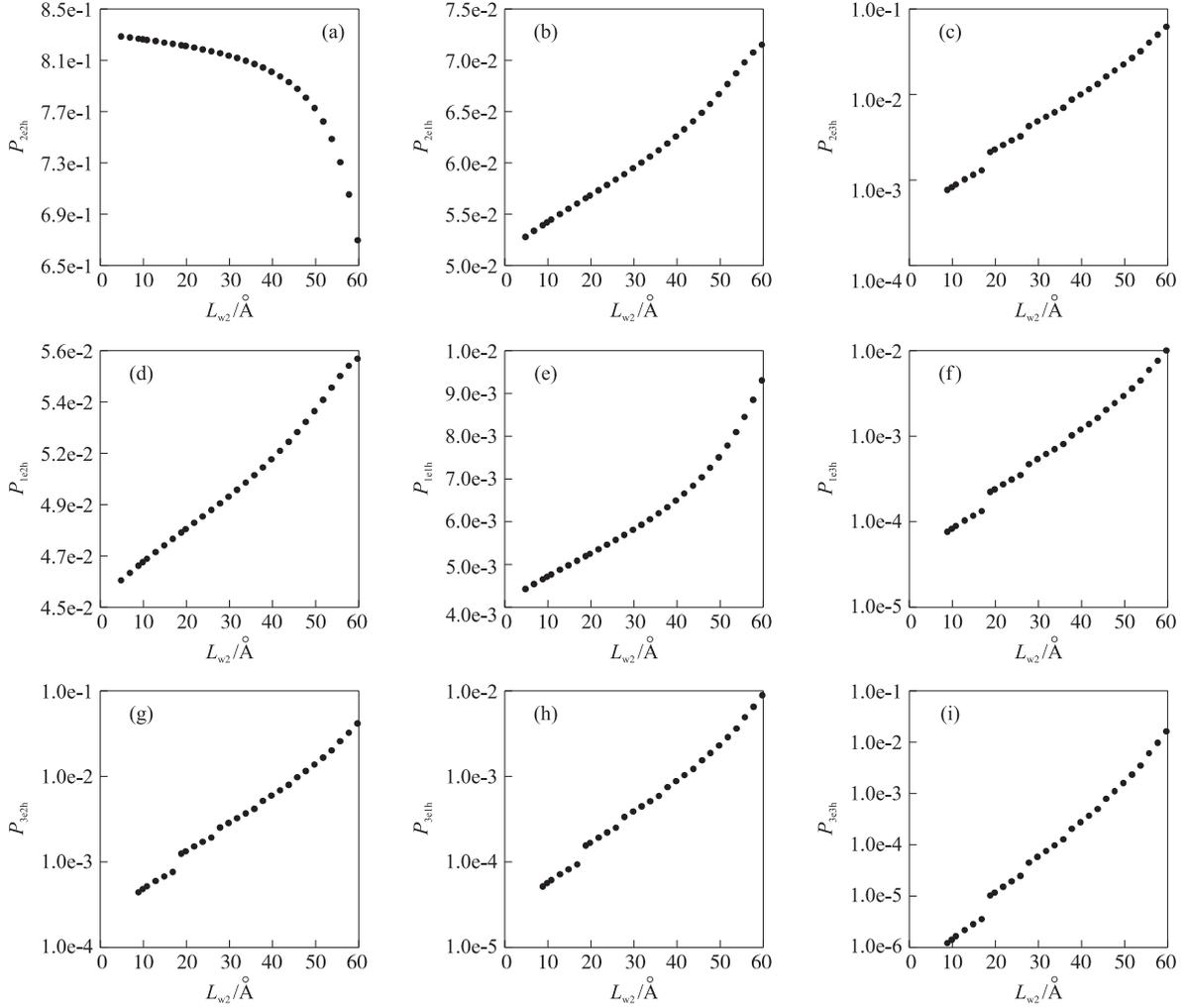


图5 轻空穴激子态中电子与空穴在空间不同区域的分布几率:

(a)  $P_{2e,2h}$ ; (b)  $P_{2e,1h}$ ; (c)  $P_{2e,3h}$ ; (d)  $P_{1e,2h}$ ; (e)  $P_{1e,1h}$ ; (f)  $P_{1e,3h}$ ; (g)  $P_{3e,2h}$ ; (h)  $P_{3e,1h}$ ; (i)  $P_{3e,3h}$

Fig.5 Probability distribution in different space region of electron and hole for a light hole exciton state:

(a)  $P_{2e,2h}$ ; (b)  $P_{2e,1h}$ ; (c)  $P_{2e,3h}$ ; (d)  $P_{1e,2h}$ ; (e)  $P_{1e,1h}$ ; (f)  $P_{1e,3h}$ ; (g)  $P_{3e,2h}$ ; (h)  $P_{3e,1h}$ ; (i)  $P_{3e,3h}$

电子与空穴在对称双势阱下有共振隧穿发生,即使处在基态,也有 100% 几率穿透到另一阱,导致波函数是对称或反对称性质的,对电子和空穴的限定减小到最小,因此结合能将达到最小.

### 3 总结与讨论

本文在有效质量近似下,采用变分法计算了阱宽不同的非对称耦合双量子阱系统中重/轻空穴激子态及结合能.研究了激子结合能与右阱宽的关系.发现在左阱宽固定的情况下,  $L_{w_1} = 70 \text{ \AA}$ , 右阱宽从  $L_{w_2} = 5 \text{ \AA}$  到  $L_{w_2} = 60 \text{ \AA}$  的变化过程中,重/轻空穴激子态的结合能单调减小.在  $L_{w_2} \leq 40 \text{ \AA}$  之前,减小的较慢,之后减小的速度加快.重空穴激子的结合能小于轻空穴激子的结合能.本文也计算了在重/轻空穴激子态下,电子与空穴在  $z$  方向的平均距离  $\langle \Delta z \rangle$  及在垂直  $z$  方向的  $xy$  平面内的平均距离  $\langle \rho \rangle$ . 发现  $\langle \Delta z \rangle$  和  $\langle \rho \rangle$  随右阱宽度的增加而单调地增加.重空穴激子态的  $\langle \Delta z \rangle$  总是小于轻空穴激子态的  $\langle \Delta z \rangle$ , 而重空穴激子态的  $\langle \rho \rangle$  总是大于轻空穴激子态的  $\langle \rho \rangle$ . 这与重/轻空穴的质量关系  $m_+ > m_-$ ,  $\mu_+ < \mu_-$  一致.本文还计算了给定重/轻空穴激子态下电子和空穴在空间位置的分布情况.发现轻空穴激子态中电子和空

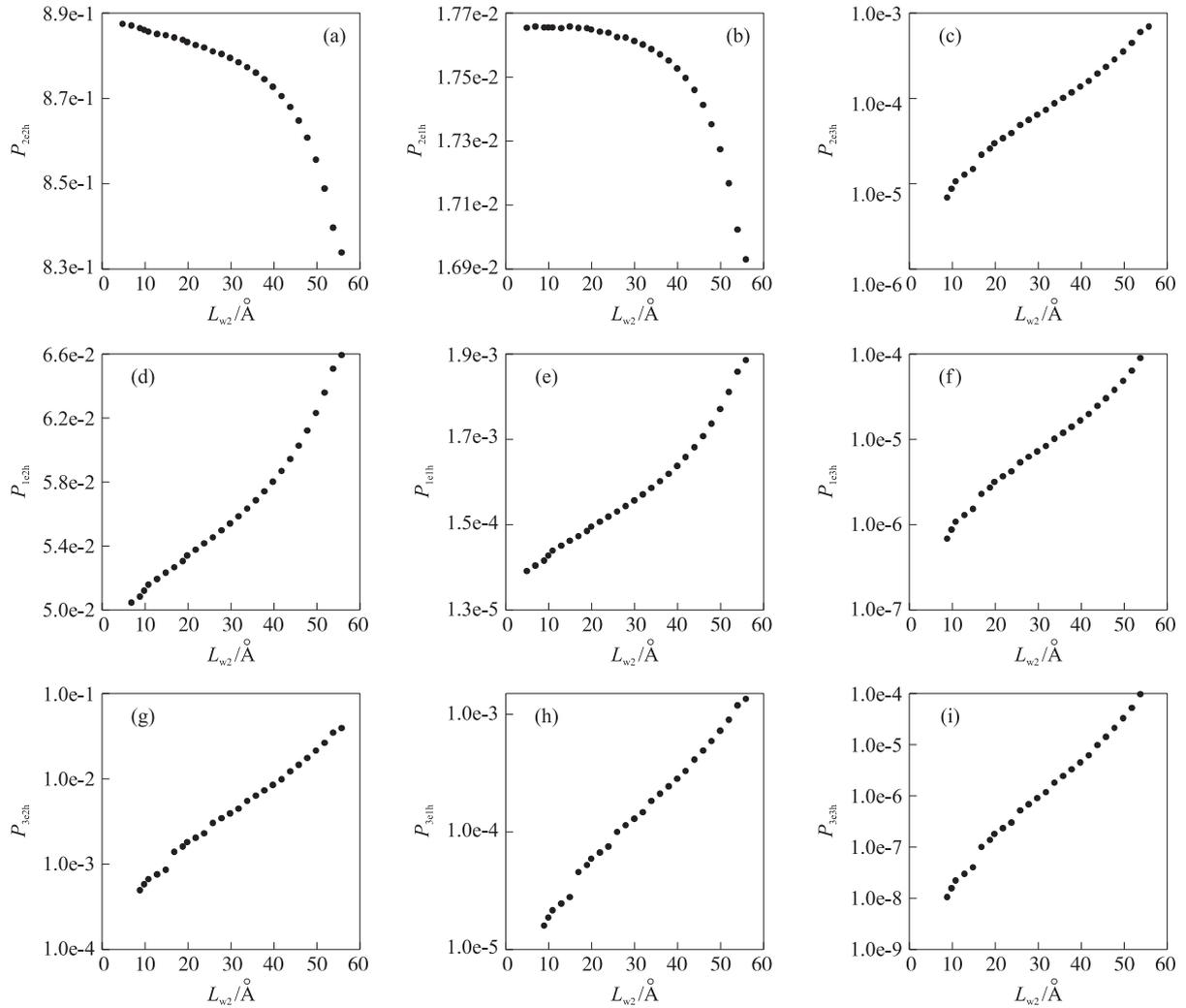


图6 重空穴激子态中电子与重空穴在空间不同区域的分布几率:

(a)  $P_{2e2h}$ ; (b)  $P_{2e1h}$ ; (c)  $P_{2e3h}$ ; (d)  $P_{1e2h}$ ; (e)  $P_{1e1h}$ ; (f)  $P_{1e3h}$ ; (g)  $P_{3e2h}$ ; (h)  $P_{3e1h}$ ; (i)  $P_{3e3h}$

Fig.6 Probability distribution in different space region of electron and hole for a heavy hole exciton state:

(a)  $P_{2e2h}$ ; (b)  $P_{2e1h}$ ; (c)  $P_{2e3h}$ ; (d)  $P_{1e2h}$ ; (e)  $P_{1e1h}$ ; (f)  $P_{1e3h}$ ; (g)  $P_{3e2h}$ ; (h)  $P_{3e1h}$ ; (i)  $P_{3e3h}$

穴都处在左势阱的几率在 66%~82.5%之间,重空穴激子态中电子和空穴都处在左阱的几率在 83%~89%之间,根据右阱宽的不同而异,随右阱宽度的增加而减小.电子和空穴分布在其他区域的几率很小.重/轻空穴激子态中电子与空穴都处在左势阱的几率的差别也是由于质量效应的缘故,质量大的空穴不易隧穿,有较强的局域性.

在这篇文章中我们选择 Al 组份的浓度为  $x=0.3$ ,这是基于对  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  单量子阱系统,Al 组份浓度  $x$  的取值范围通常为 0.1~0.45 的缘故.业已发现在给定量子阱宽度下, $x$  的值越小,势阱越浅,其 1s 激子态的结合能越小, $x$  值越大,势阱越深,1s 激子态的结合能越大.本文中在左势阱宽  $L_{w1}=70 \text{ \AA}$  下,我们选择了右阱宽的范围为  $L_{w2}=5 \text{ \AA} \sim 60 \text{ \AA}$ ,未达到  $70 \text{ \AA}$ ,这是因为对称双势阱中存在近简并的双能级,它们的分裂大约是 10 meV,与库仑相互作用大致相同,而库仑相互作用将引起这两个态的混合,故对量子对称双势阱本文的处理方法不再适用.对于阱宽相同而由于 Al 浓度不同所得到的非对称双量子阱系统,如  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs/Al_yGa_{1-y}As$ ,及  $0.1 \leq y \leq 0.3$ ,随 Al 的浓度  $y$  的增加,右势阱变深,其重/轻空穴激子结合能的行为与本文的结果类似.

[参考文献]

[1] MILLER R C, KLEINMAN D A, TSANG W T, et al. Observation of the excited level of excitons in GaAs quantum wells[J].

- Phys Rev B, 1981, 24:1 134–1 136.
- [2] BASTARD G, MENDEZ E E, CHANG L L, et al. Exciton binding energy in quantum wells[J]. Phys Rev B, 1982, 26: 1 974–1 979.
- [3] GREENE R L, BAJAJ K K, PHELPS D E. Energy levels of wannier excitons in GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well structures[J]. Phys Rev B, 1984, 29:1 807–1 812.
- [4] LAHELD U E H, PEDERSEN F B, HEMMER P C. Excitons in type-II quantum dots: finite offset[J]. Phys Rev B, 1995, 52: 2 697–2 703.
- [5] JADCZAK J, KUBISA M, RYCZKO K, et al. High magnetic field spin splitting of excitons in asymmetric GaAs quantum wells [J]. Phys Rev B, 2012, 86:245401–1–6.
- [6] FOX A M, MILLER D A B, LIVESCU G, et al. Excitonic effects in coupled quantum wells[J]. Phys Rev B, 1991, 44: 6 231–6 242.
- [7] CRUZ H. Dynamics of indirect excitons in a coupled quantum well pair[J]. J Appl Phys, 2013, 113:153706–1–6.
- [8] BALDWIN T K, MCGILL S A, WANG H. Exciton-correlated hole tunneling in mixed type GaAs quantum wells[J]. Phys Rev B, 2014, 90:035304–1–6.
- [9] CEN J, CHEN R, BAJAJ K K. Exciton binding energy in dielectric quantum well in magnetic field[J]. Phys Rev B, 1994, 50: 10 947–10 952.
- [10] ARULMOZHI M, ANITHA A. Excitons in a surface quantum well[J]. Superlattices and microstructures, 2014, 75:222–232.
- [11] NICULESCU E C, CRISTEA M, SPANDONIDE A. Exciton state in CdSe/ZnS core-shell quantum dots under applied electric field[J]. Superlattices and microstructures, 2013, 63: 1–9.
- [12] RAMVALL P, RIBLET P, NOMURA S, et al. Optical properties of GaN quantum dots[J]. J Appl Phys, 2000, 87: 3 883–3 890.
- [13] TAWARA T, TANAKA S, KUMANO H, et al. Growth and luminescence properties of self-organized quantum dots[J]. Appl Phys Lett, 1999, 75:235–237.
- [14] TANG Z K, WONG C K L, YU P, et al. Room-temperature ultraviolet laser emission from self-assembled ZnO microcrystalite film[J]. Appl Phys Lett, 1998, 72:3 270–3 272.
- [15] YU G, LI G, JIA Y, TANG G. Exciton state in metallic zigzag single-walled carbon nanotubes under uniaxial strain[J]. Superlattices and microstructures, 2014, 75: 1–8.
- [16] DESLIPPE J, SPATARU C, PRENDERGAST D, et al. Bound excitons in metallic single-walled carbon nanotubes[J]. Nano Lett, 2007, 7: 1 626–1 630.
- [17] SPATARU C D, ISMALL-BEIGI S, BENEDICT L X, et al. Extonic effects and the optical spectra of single-walled carbon nanotubes[J]. Phys Rev Lett, 2004, 92:077402–077404
- [18] MALIC E, MAULTZSCH J, REICH S, et al. Extonic Rayleigh scattering spectra of metallic single-walled carbon nanotubes [J]. Phys Rev B, 2010, 82:115439–1–7
- [19] WEIMER J S, MILLER D A B, CHEMLA D S. Strong polarization-sensitive electroabsorption in GaAs/AlGaAs quantum well waveguide[J]. Appl Phys Lett, 1985, 47:1 148–1 150.
- [20] BRUM J A, BASTARD G. Electric-field-induced dissociation of extons in semiconductor quantum wells [J]. Phys Rev B, 1985, 31:3 893–3 898.
- [21] UEDA T, AN Z, KOMIYAMA S. Charge-sensitive infrared phototransistors[J]. J Appl Phys, 2008, 103:093109–1–7.
- [22] Gilmore R. 2004 Elementary quantum mechanics in one dimension[M]. Baltimore & London: The Johns Hopkins University Press, 2004:91.
- [23] STERN F, SARMA S D. Electron energy levels in GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>Al heterojunctions[J]. Phys Rev B, 1984, 30:840–848.

[责任编辑:顾晓天]