

像势对量子阱中类氢杂质 Stark 效应的影响

张向东 李有成 孔小均 魏成文

(半导体超晶格国家重点实验室 北京 100083) (河北师范大学物理系 石家庄 050016)

摘要 在考虑像势影响的情况下,利用变分方法计算了垂直电场下量子阱中类氢杂质的结合能,给出了像势引起的结合能增量随阱宽、杂质位置和电场的变化曲线.结果表明:考虑像势对量子阱中类氢杂质结合能及其 Stark 效应的影响是很必要的,而且自像势和互像势对类氢杂质结合能 Stark 效应的影响是相反的.

PACC: 6865, 7865, 7155, 7280E

1 引言

近年来,随着外加电场作用下量子阱中光电特性研究的深入,许多作者^[1-15]对垂直电场下量子阱的子带、类氢杂质和激子态问题作了讨论.这些研究无疑加深了人们对这一领域的认识.然而,所有这些工作都有一个共同的特点:就是忽略了由于垒和阱中介电常数的不同所引起的像势的影响.原因是以前制备出来的半导体超晶格都是由两种较匹配的材料组成的.人们估计对于这样的超晶格像势的影响会是很小的,所以在计算时都把它忽略了.随着晶体生长技术例如分子束外延和金属有机化学气相沉积技术的发展,生长出不太匹配的两种材料组成的超晶格逐渐成为可能.对于这样的超晶格和量子阱(文献[17]把它称为 dielectric quantum well)像势的作用就显得格外重要了.最近 S. Fraizzoli^[16]、Masami Kumagai^[17]以及 D. B. Tran Thoai 等^[18]对无场下“量子阱中像势影响问题”做了讨论.发现:考虑像势对量子阱中类氢杂质和激子能态的修正是很必要的.即使对于两种非常匹配的材料形成的量子阱,像势的影响也要比以前人们估计的大得多.据我们所知,存在外电场作用时像势对类氢杂质结合能的影响,换句话说,像势对量子阱中类氢杂质结合能 Stark 效应的影响以前还没人讨论过.本文利用变分的方法较详细地讨论了垂直电场下量子阱中像势对类氢杂质束缚能及其 Stark 效应的影响.为了突出体现像势的作用和简化计算,我们在计算中忽略了应变张量的影响,采用无限深势阱模型.应该指出,实际量子阱结构中不存在无限深势阱.因而,在电场作用下严格地讲不存在束缚态.本文在无限势近似下的计算结果是对实际量子阱中准束缚态^[1]的近似,其寿命是否长到能够在实验中观测到还有待进一步研究.

张向东 男,1966 年生,讲师,主要从事固体理论的研究
李有成 男,1943 年生,教授,主要从事凝聚态理论的研究
1994 年 1 月 2 日收到初稿,1994 年 5 月 2 日收到修改稿

2 理论计算

在阱宽 L 的量子阱中有一类氢杂质,受垂直阱层方向 z 的电场 F 作用.若选阱中心为坐标原点.在有效质量近似下,考虑像势的影响系统的哈密顿可以写为

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{r} + V_{\text{im}}^{\text{SIM}} + V_{\text{im}}^{\text{MIM}} + Qz + V(z) \quad (1)$$

$$\text{其中 } V(z) = \begin{cases} 0 & |z| < L/2 \\ \infty & |z| \geq L/2 \end{cases} \quad Q = |e|Fa^*/R^*$$

$$V_{\text{im}}^{\text{MIM}} = -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2q_{2n+2}}{\{\rho^2 + [z - z_i - 2(n+1)L]^2\}^{1/2}} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2q_{2n+2}}{\{\rho^2 + [z - z_i + 2(n+1)L]^2\}^{1/2}} \\ - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2q_{2n+1}}{\{\rho^2 + [z - z_i - (2n+1)L]^2\}^{1/2}} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2q_{2n+1}}{\{\rho^2 + [z - z_i + (2n+1)L]^2\}^{1/2}}$$

$$V_{\text{im}}^{\text{SIM}} = \frac{q_1}{|2z+L+2\delta|} + \frac{q_1}{|2z+L-2\delta|} + \sum_{n=\pm 2, \pm 3, \dots} \frac{q_n}{|z - (-1)^n z + nL|}$$

$$q_n = \left(\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \right) |n| \quad \rho^2 = x^2 + y^2$$

在方程(1)中,所有的能量和长度分别以 GaAs 的有效里德堡 $R^* (=m_1^* e^4 / (2\hbar^2 \epsilon_1^2))$ 和有效玻尔半径 $a^* (= \hbar^2 \epsilon_1 / m_1^* e^2)$ 为单位, m_1^* 为阱中电子的有效质量, ϵ_1 和 ϵ_2 分别为阱和垒中介电常数. $r = [\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}$ 表示电子与类氢杂质中心的距离, z_i 是杂质中心在 z 方向的坐标,让 z 轴通过杂质中心, $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$ 表示 xy 面内电子与杂质中心的距离.

$-2/r$ 是电子和杂质之间的库仑势, $V_{\text{im}}^{\text{MIM}}$ 和 $V_{\text{im}}^{\text{SIM}}$ 表示像势. $V_{\text{im}}^{\text{MIM}}$ 是互像势, $V_{\text{im}}^{\text{SIM}}$ 是自像势. 两种像势的表达式可以通过解满足量子阱边界条件的泊松方程来获得. 值得注意的是 $V_{\text{im}}^{\text{SIM}}$ 的表达式分母中含有 $(2z+L)$ 项. 当 $z \rightarrow \pm L/2$ 时, $V_{\text{im}}^{\text{SIM}}$ 发散. 这里因为人为地引入了镜像反射面,导致了极化面电荷没有空间的伸展所造成的. 为了解决这个问题我们引进像移 δ . 像移 δ 是人为引入的,有关其第一性原理的决定性超出了本文的范围. 目前对于 δ 的选取还没有一个固定的标准,然而幸运的是一些物理量(如激子或杂质的结合能)对 δ 的依赖性并不很强(文献[17]计算的结果). 我们参考文献[17]选 $\delta = 0.001$.

(1)没有杂质时,不考虑自像势的影响,垂直电场下量子阱中电子运动状态满足方程

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} \right) + Qz + V(z) \varphi(z) = E_0 \varphi(z)$$

严格说,此方程的解为两个 Airy 函数的线性组合. 利用 Airy 函数求解是比较复杂的,我们不妨利用变分方法来求方程的近似解. 选取试探波函数

$$\varphi(z) = \begin{cases} N_0(\beta) \cos(\pi z/L) \exp(-\beta z/L) & |z| < L/2 \\ 0 & |z| \geq L/2 \end{cases}$$

式中 β 为变分参数, $N_0(\beta)$ 为正交系数,由归一化条件来决定. 则本征能量 E_0 为

$$E_0 = (\pi^2 + \beta^2)/L^2 + QL\{1/2\beta + [\beta/(\beta^2 + \pi^2)] - \frac{1}{2} \coth \beta\}$$

考虑自像势影响后,垂直电场下量子阱中电子的基态能量,可以近似表示为^[17]

$$E_0 \cong \min_{\beta} [E_0 + \langle \varphi(z) | V_{\text{im}}^{\text{SIM}} | \varphi(z) \rangle]$$

(2) 有杂质存在时, 垂直电场下量子阱中电子的基态为方程(1)中 H 的本征解. 我们仍然利用变分法来求电子的基态能量, 为此我们选用含有两个变分参量 λ 和 β 的试探波函数

$$\Psi(x, y, z) = \begin{cases} N(\lambda) \cos(\pi z/L) \exp(-\beta z/L - r/\lambda) & |z| < L/2 \\ 0 & |z| \geq L/2 \end{cases}$$

$N(\lambda)$ 为正交系数.

则垂直电场下量子阱中类氢杂质的束缚能为: $E_b = E_c - E^b$

$$E^b = \min_{\lambda\beta} \{ \langle \varphi | H | \Psi \rangle \} = \min_{\lambda\beta} \{ A_1 + A_2 + A_3 \}$$

其中:

$$A_1 = \langle \Psi | (-\nabla^2 - \frac{2}{r} + Qz) | \Psi \rangle$$

$$A_2 = 2\pi N(\lambda) \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_0^{\infty} \cos^2(\pi z/L) \exp\{-2\beta z/L - 2[\rho^2 + (z - z_i)^2]^{1/2}/\lambda\} V_{\text{im}}^{\text{MIM}} \rho d\rho$$

$$A_3 = \frac{\pi\lambda N^2(\lambda)}{4} \int_{-L/2}^{L/2} [1 + \cos(2\pi z/L)] (1 + 2|z - z_i|/\lambda) \exp(-2|z - z_i|/\lambda - 2\beta z/L) V_{\text{im}}^{\text{SIM}} dz$$

A_1 可解析积分出. A_2 和 A_3 分别来自于互像势和自像势的自能修正, 需利用数值积分求得.

3 数值计算结果和讨论

我们着重以铝的浓度 $x=0.4$ 的 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱为例进行讨论, 最后再给出 GaAs-ZnSe 量子阱的计算结果. 材料参数取文[16, 17]中的数据, $m_1=0.067m_0$, m_0 为自由电子质量. 对于 Ga_{1-x}Al_xAs: $\epsilon_2=12.53-2.73x$; 对于 ZnSe: $\epsilon_2=7.6$. 由于我们采用无限深势阱模型, 所以忽略了垒和阱中电子有效质量的差别.

通过数值计算我们首先得到了在确定电场下类氢杂质的束缚能随杂质位置(图 1)和阱宽(图 2)的变化曲线. $\alpha=z_i/L$ 为阱中杂质位置参数. 在不考虑像势影响时, 所得结果(虚线)与文献[9]相一致. 杂质在阱中心右边($\alpha>0$)时, 电场的作用使杂质结合能减小. 反之, 杂质在左边($\alpha<0$ 时), 电场的作用使结合能增加. 量子限制效应减小了杂质结合能的 Stark 移动.

考虑像势的作用后, 我们发现像势的影响并不改变上述的这种变化规律, 只是促进了这种变化. 无论杂质在阱中何处, 场强多大, 像势的影响总是使杂质结合能增加, 这一点与无场情况下像势的作用是相似的. 与无场情况不同之处在于像势使杂质结合能的提高不仅随杂质位置不同而有所不同, 而且还随电场的不同有所变化. 这一点从图 3, 4 和 5 中会看得很清楚.

图 1 和 2 中的实线既包括了互像势作用也包括了自像势的影响, 是自像势和互像势总的作用的结果. 图 3(a)和(b)分别描绘了自像势引起的结合能增量 ES 和总像势引起的结合能增量 $(ES+EM)$ 在不同电场下, 随杂质位置的变化关系. 由图可清楚看出, ES 和 $(ES+EM)$ 不仅随杂质在阱中位置不同而不同, 而且随电场的不同有明显的变化. 但 ES 和 EM 随

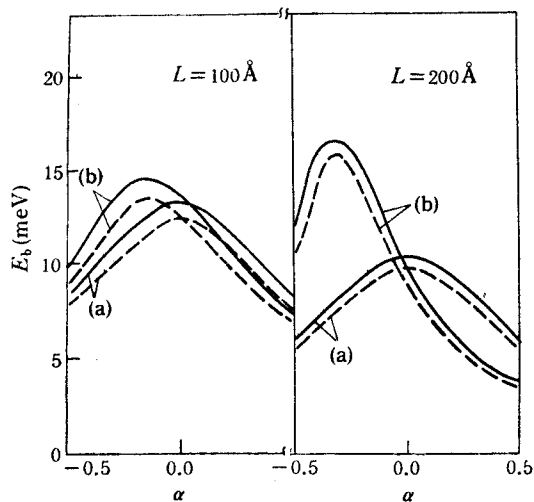


图 1 杂质结合能随杂质位置的变化关系

(a) $F=0$ 时 (b) $F=200\text{ kV/cm}$

——表示考虑像势影响 ---表示不考虑像势影响

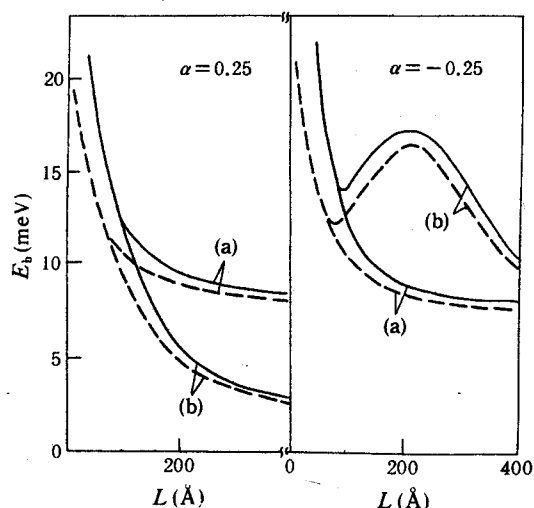


图 2 不同电场下杂质结合能随阱宽的变化关系

(a) $F=0$ 时 (b) $F=200\text{ kV/cm}$

——表示考虑像势影响 ---表示不考虑像势影响

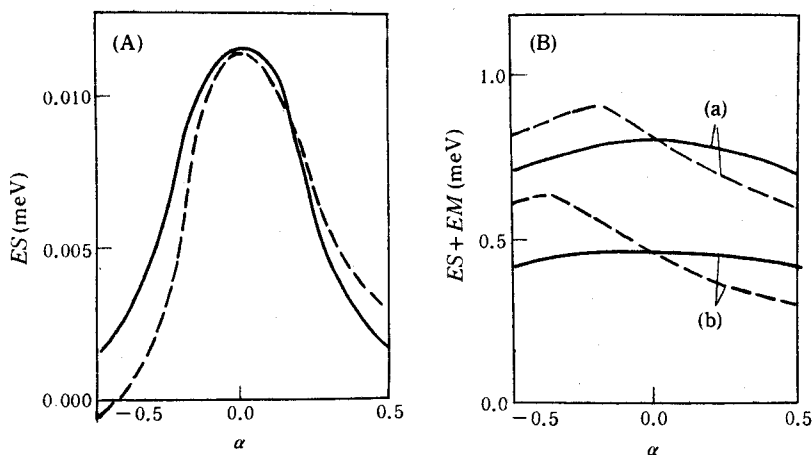


图 3 (A) 自像势对杂质结合能的修正对应杂质位置的关系曲线

—— $F=0$ --- $F=300\text{ kV/cm}$

(B) 总像势对杂质结合能的修正对应杂质位置的关系曲线

—— $F=0$ --- $F=500\text{ kV/cm}$ (a) $L=100\text{\AA}$ (b) $L=200\text{\AA}$

电场的变化趋势是完全相反的. 这从图 4 中将会看得更清楚. 这是由于自像势的排斥作用和互像势的吸引作用造成的. 不过 ES 比 EM 小得多, 它只有 EM 的 1—2%, 因此, 像势对结合能的影响主要依赖于互像势的贡献.

我们在图 4(a) 和 (b) 中分别给出了 $L=100\text{\AA}$ 时, ES 和 $(ES+EM)$ 随电场的变化曲线. 当杂质在阱中心左边 ($\alpha < 0$) 时, 电场的作用使电子和杂质间距减小, 导致了互像势影响的增加和自像势作用的减小. 但由于 ES 很小, 所以像势对结合能的总的修正 ($ES+EM$) 随电场的增加而增加. 因此, 考虑像势影响后, 阱中心左边的杂质结合能随电场的增加而增加的会

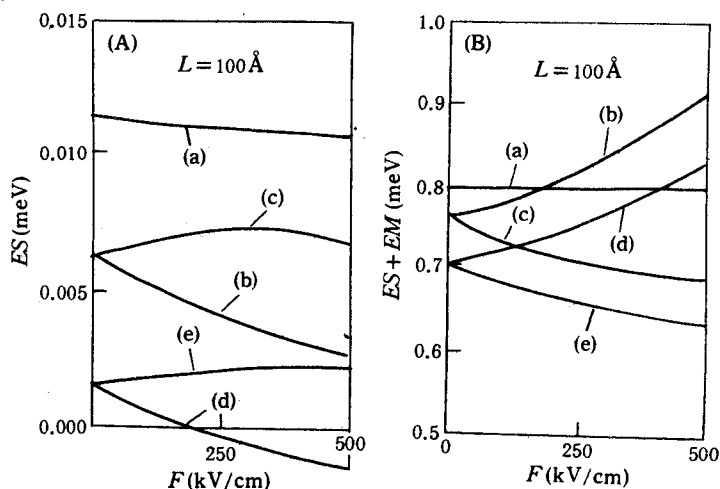


图 4 $L=100\text{Å}$ 时, 自像势(a)和总的像势(b)对杂质结合能的修正随电场的变化曲线

$a-e$ 分别对应 $\alpha=0.0, -0.25, 0.25, -0.5, 0.5$

更快. 当杂质在阱中心右边($\alpha>0$)时, 情况正好相反. 即考虑像势影响后, 杂质结合能随电场的增加而减小的会更快. 杂质在阱中心分两种情况, 当 $L<110\text{Å}$ 时, 与 $\alpha<0$ 情况相同; 当 $L>110\text{Å}$ 时, 则与 $\alpha>0$ 情况相一致. 总之, 尽管自像势的作用减小了杂质结合能的 Stark 移动, 但总的像势影响还是增加了杂质结合能的 Stark 移动. 比如对于 $L=100\text{Å}$ 的 GaAs-Ga_{0.6}Al_{0.4}As 量子阱, 当 $\alpha=0.25$ 、 $F=100\text{kV/cm}$ 时, 像势引起的 Stark 移动增量 $\sim 5.6\%$.

图 5 表示的是在不同电场下, $(ES+EM)$ 随阱宽 L 的变化曲线. 从图上可以看出, 随阱宽的增加像势引起的结合能增量 $(ES+EM)$ 逐渐减小. 但随阱宽的增加, 量子限制效应减小了, 结合能的 Stark 移动增加, 像势引起的 Stark 移动的变化量随阱宽增加反而有所增加.

以上我们讨论的是比较匹配的 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱, 对于不太匹配的两种材料形成的量子阱, 像势的作用会更大. 例如对于 $L=100\text{Å}$ 的 GaAs-ZnSe 量子阱像势可引起中心杂质结合能增大 $\sim 39.5\%$. 对于这样的量子阱, 再忽略像势的影响是很难想像的.

总之, 在考虑像势影响的情况下, 利用变分方法我们计算了垂直电场下量子阱中类氢杂质的结合能. 我们发现: 虽然量子限制效应减小了类氢杂质结合能的 Stark 移动, 但像势的影响却增加了类氢杂质结合能的 Stark 移动. 考虑像势影响对类氢杂质结合能及其 Stark 效应的修正是很必要的.

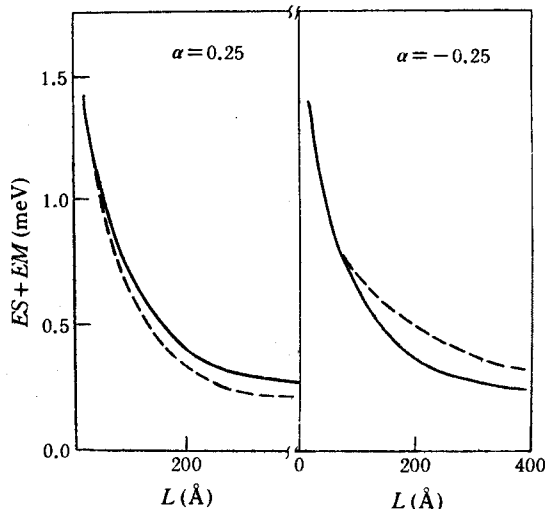


图 5 像势对结合能的修正随阱宽的变化曲线

— $F=0$ --- $F=200\text{kV/cm}$

参 考 文 献

- [1] Miller D. A. B., Chemla D. S., Damen T. C., *et al.*, Phys. Rev. Lett., 1984, **53**:2173; Phys. Rev., 1985, **B32**:1047.
- [2] Chen Y. J., Koteles E. S., Elman B. S. *et al.*, Phys. Rev. 1987, **B36**:4562.
- [3] Ahn D and Chuang S. L., Phys. Rev., 1986, **B34**:9034; Phys. Rev., 1987, **B35**:4149.
- [4] Colling R. T., Vina L., Wang W. I., *et al.*, Phys. Rev., 1987, **B36**:1531.
- [5] Austin E. J and Jaros M., Phys. Rev., 1988, **B38**:6326.
- [6] Yu P. W., Sander G. D., Evans K. R., *et al.*, Phys. Rev., 1988, **B38**:7796.
- [7] Barrio D. P., Glasser M. L., Velasco V. R *et al.*, J. Phys., 1987, **C1**:4339.
- [8] G. Bastard, Mendez E. E., Chang L. L *et al.*, Phys. Rev., 1983, **B28**:3241.
- [9] Chen Hao, Li Xiang-Dong and Zhou Shi-Xun, Phys. Rev., 1991, **B44**:6220.
- [10] Li You-Cheng and Gu Shi-Wei, J. Phys., 1992, **C4**:135.
- [11] Li You-Cheng and Gu Shi-Wei, Phys. Rev., 1992, **B45**:12102.
- [12] 夏建白, 黄昆, 物理学报, 1988, **37**:1.
- [13] Jia-Lin Zhu, Dao-Hua Tang and Jia-Jiong Xong, Phys. Rev., 1989, **B39**:8609; 物理学报, 1989, **38**:385; 半导体学报, 1989, **10**:565.
- [14] B. F. Zhu, Phys. Rev., 1988, **B38**:13316.
- [15] 李树深, 半导体学报, 1991, **12**:715.
- [16] S. Fraizzoli, F. Bassani and R. Buczko, Phys. Rev., 1990, **B41**:5096.
- [17] Masami Kumagai and Toshihide Takagahara, Phys. Rev., 1989, **B40**:12359.
- [18] D. B. Tran Thoai, R. Zimmermann, M. Grundmann and D. Bimberg, Phys. Rev., 1990, **B42**:5906.

Effect of Image Potential on Stark Shift of Hydrogenic Impurity States in Quantum Well

Zhang Xiangdong, Li Youcheng, Kong Xiaojun and Wei Chengwen

(National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Beijing 100083)

(Department of Physics, Hebei Teacher's University, Shijiazhuang, 050016)

Received 21 January 1994, revised manuscript received 2 May 1994

Abstract With consideration of the image potential, the binding energy of the ground bound state of an isolated hydrogenic impurity in a quantum well subjected to external electric field is studied by means of the variational technique. The influence of the image potential is obtained as a function of the impurity position, well width, and electric field strength. It is found that the image potential effect will give significant corrections to the impurity binding energy and its Stark shift. The effects of self-image potential and mutual-image potential on the Stark shift are just opposed.

PACC: 6865, 7865, 7155, 7280E