

磁场和杂质对激子低能谱的效应*

刘益民¹, 黄钢明², 鲍诚光²

(1. 韶关学院物理学系, 广东 韶关 512005;

2. 中山大学物理学系, 广东 广州 510275)

摘 要: 探讨了磁场 B 和杂质对二维激子低态能谱的效应。杂质被固定在 z 轴上且与激子所在的平面的距离为 d 。用直接对角化方法获得了激子低态能量 E 随 B 和 d 的演化。当 d 一定时, 对于中性杂质(或者无杂质)和带正电杂质, E 随 B 的增加而增加。而对于带负电杂质, 激子的角动量 L 等于 0 时, 能量 E 曲线上升; L 等于 1、2、3 时, 能量 E 曲线先下降后上升。当 B 一定时, 对于带电杂质, E 先随 d 增加而急剧增加, 后随 d 增加而几乎不变。

关键词: 激子; 磁场; 杂质; 能谱

中图分类号: O471.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2005) 05-0030-04

近年来, 人们对半导体量子点或量子阱中的各种激子(单个激子、带电激子、双激子、偶合量子点激子等)进行了广泛的研究^[1-8]。除了探求激子理论及动力学特征之外, 一般比较关注两个方面, 一是激子的能量(包括激子的总能量、束缚能、结合能等); 二是各种可控物理因素的效应, 比如磁场效应、介电常数效应、量子限制效应等。然而, 在磁场中带有杂质的激子还未被研究。本文的目的是探讨磁场和杂质对量子点中激子的低态能谱的综合效应, 阐明受到磁场和杂质作用的二维激子模型和把激子的哈密顿量对角化的方法; 分别在中性杂质(即无杂质)、正杂质和负杂质的情形下, 找出激子低态能谱随磁场和杂质距离的变化规律文。

1 受到磁场和杂质作用的二维激子理论

在平面上一个包含 N_e 个电子和 N_h 个空穴的激子型量子点(以下简称激子), 对其施加垂直于 $x-y$ 平面的外部磁场 B , 且其附近存在一个电量为 q 的杂质(设在 z 轴上), 如图 1 所示。又设激子系统处于频率为 ω_0 的轴对称抛物势中, 则其哈密顿量为

$$H = \sum_{j_e=1}^{N_e} \left[\frac{1}{2m_e^*} (\mathbf{p}_{j_e} - e\mathbf{A}_{j_e})^2 + \frac{1}{2} m_e^* \omega_0^2 r_{j_e}^2 \right] +$$

$$\sum_{j_h=1}^{N_h} \left[\frac{1}{2m_h^*} (\mathbf{p}_{j_h} + e\mathbf{A}_{j_h})^2 + \frac{1}{2} m_h^* \omega_0^2 r_{j_h}^2 \right] + V_{ee} + V_{hh} + V_{eh} + V_{eq} + V_{hq} \quad (1)$$

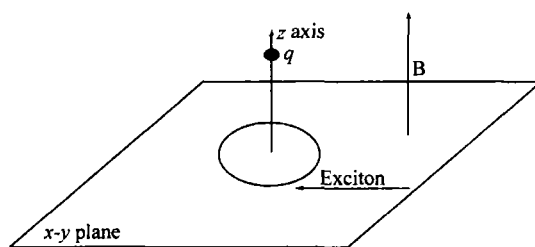


图 1 受到磁场 B 和杂质 q 作用的二维激子示意图

Fig.1 The model of a 2-dimensional exciton subjected to magnetic field B and affected by an impurity q

式中电子与电子($e-e$)相互作用能 V_{ee} 、空穴与空穴($h-h$)相互作用能 V_{hh} 、电子与空穴($e-h$)相互作用能 V_{eh} 、电子与杂质($e-q$)相互作用能 V_{eq} 和空穴与杂质($h-q$)相互作用能 V_{hq} 分别为

$$V_{ee} = \sum_{j_{e1} < j_{e2}}^{N_e} \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{j_{e1}j_{e2}}} \quad (2)$$

$$V_{hh} = \sum_{j_{h1} < j_{h2}}^{N_h} \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{j_{h1}j_{h2}}} \quad (3)$$

$$V_{eh} = - \sum_{j_e=1}^{N_e} \sum_{j_h=1}^{N_h} \frac{e^2}{4\pi\epsilon r_{j_ej_h}} \quad (4)$$

* 收稿日期: 2005-01-12

基金项目: 国家自然科学基金重点资助项目(90103028); 国家自然科学基金资助项目(10174098)

作者简介: 刘益民(1965年生), 男, 博士, 副教授; 通讯联系人: 鲍诚光; E-mail: stsbcg@zsu.edu.cn

$$V_{eh} = \sum_{j_e=1}^{N_e} \frac{eq}{4\pi\epsilon \sqrt{d^2 + r_{j_e}^2}} \quad (5)$$

$$V_{hq} = - \sum_{j_h=1}^{N_h} \frac{eq}{4\pi\epsilon \sqrt{d^2 + r_{j_h}^2}} \quad (6)$$

因 zeeman 项很小而被忽略。下指标 j_e 和 e 代表电子, 而 j_h 和 h 代表空穴。式中 $\mathbf{r}_j$ ($\mathbf{p}_j$) 是以量子点中心为原点的第 j 个电子或空穴的位置矢量 (动量), d 是电荷为 q 的杂质与 $x-y$ 平面的垂直距离。 m_e^* 和 m_h^* 分别表示电子和空穴的有效质量, ϵ 为介电常数, $e = -1.602192 \times 10^{-19}$ 库仑。 $\mathbf{r}_{j_e j_{e2}} = |\mathbf{r}_{j_e1} - \mathbf{r}_{j_{e2}}|$; $\mathbf{r}_{j_{h1} j_{h2}} = |\mathbf{r}_{j_{h1}} - \mathbf{r}_{j_{h2}}|$; $\mathbf{r}_{j_e j_h} = |\mathbf{r}_{j_e} - \mathbf{r}_{j_h}|$ 。取矢势 $\mathbf{A} = (B/2)(-y, x, 0)$, 则

$$H = \sum_{j_e=1}^{N_e} \left[\frac{p_{j_e}^2}{2m_e^*} + \frac{1}{2} m_e^* \omega_e^2 r_{j_e}^2 \right] - \frac{1}{2} \omega_e L_e + \sum_{j_h=1}^{N_h} \left[\frac{p_{j_h}^2}{2m_h^*} + \frac{1}{2} m_h^* \omega_h^2 r_{j_h}^2 \right] + \frac{1}{2} \omega_h L_h + V_{ee} + V_{hh} + V_{eh} + V_{eq} + V_{hq} \quad (7)$$

上式中 $\omega_e = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_{ec}^2}/4$, $\omega_e = |e|B/m_e^*$; $\omega_h = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_{hc}^2}/4$, $\omega_h = |e|B/m_h^*$ 。 L_e 和 L_h 分别为 N_e 个电子总轨道角动量和 N_h 个空穴总轨道角动量。

为了计算的方便, 在(7)式中加、减 $m_e^* \Omega^2 r_{j_e}^2/2$ 各一项。定义

$$\zeta_{j_e} = \sqrt{\frac{m_e^* \Omega}{\hbar}} r_{j_e}, \quad \zeta_{j_h} = \sqrt{\frac{m_h^* \Omega}{\hbar}} r_{j_h}, \quad \left(D = \sqrt{\frac{m_e^* \Omega}{\hbar}} d \right) \quad (8)$$

$$\epsilon = \frac{E}{\hbar \Omega}, \quad \left(h = \frac{H}{\hbar \Omega} \right) \quad (9)$$

式(7)化为无量纲的形式

$$h = \sum_{j_e=1}^{N_e} \left[-\frac{1}{2} \nabla_{\zeta_{j_e}}^2 + \frac{1}{2} \zeta_{j_e}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_e^2}{\Omega^2} - 1 \right) \zeta_{j_e}^2 \right] - \frac{\omega_e}{2\Omega} L_e + \sum_{j_h=1}^{N_h} \left[\frac{m_e^*}{m_h^*} \left(-\frac{1}{2} \nabla_{\zeta_{j_h}}^2 + \frac{1}{2} \zeta_{j_h}^2 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{m_h^* \omega_h^2}{m_e^* \Omega^2} - \frac{m_e^*}{m_h^*} \right) \zeta_{j_h}^2 \right] + \frac{\omega_h}{2\Omega} L_h + \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \sqrt{\frac{m_e^*}{\hbar^3 \Omega}} \left(\sum_{j_e1 < j_{e2}} \frac{1}{\zeta_{j_e1 j_{e2}}} + \sum_{j_{h1} < j_{h2}} \frac{1}{\zeta_{j_{h1} j_{h2}}} - \sum_{j_e=1}^{N_e} \sum_{j_h=1}^{N_h} \frac{1}{\zeta_{j_e j_h}} \right) + \frac{eq}{4\pi\epsilon} \sqrt{\frac{m_e^*}{\hbar^3 \Omega}} \left(\sum_{j_e=1}^{N_e} \frac{1}{\sqrt{D^2 + \zeta_{j_e}^2}} - \sum_{j_h=1}^{N_h} \frac{1}{\sqrt{D^2 + \zeta_{j_h}^2}} \right) \quad (10)$$

选择单电子哈密顿量 $-\nabla_{\zeta_{j_e}}^2/2 + \zeta_{j_e}^2/2$ 的本征解 $\Phi_a(\zeta_{j_e})$ 作为单电子基矢; 单空穴哈密顿量 $-\nabla_{\zeta_{j_h}}^2/2 + \zeta_{j_h}^2/2$ 的本征解 $\Phi_b(\zeta_{j_h})$ 作为单空穴基矢。其中下标 a 和 b 分别代表 (m_a, k_a) 和 (m_b, k_b) 。包含 N_e 个电子和 N_h 个空穴的激子的基矢为单粒子基矢的乘积形式, 即乘积基。例如, 单个激

子的基矢为

$$\Phi_a(\zeta_e) \Phi_b(\zeta_h) \quad (11)$$

仿照文献 [9, 10], 用直接对角化方法可求得激子的本征能和本征函数。

2 激子低态能谱

对于 GaAs 激子型量子点, 式 (1) 的参数分别取为 $m_e^* = 0.067m_e$ (m_e 为电子的质量), $\epsilon = 12.4\epsilon_0$ (ϵ_0 为真空介电常数) $W_e = W_h = W_0$, 束缚势 $\hbar\omega_0 = 3$ meV。在本文中, 能量、长度和磁场的单位分别取 meV、nm 和 T, 电量 q 以 $|e|$ 为单位。当 $d = 0$ 时, 重空穴 (取其有效质量 $m_h^* = 0.377m_e$) 激子 X 的低态 ($L \leq 3$, L 为 X 的总轨道角动量) 能量 E 随 B 的变化如图 2 所示, 其中子图 a、b、c 分别表示一个中性杂质 ($q = 0$)、一个正杂质 ($q = |e|$)、一个负杂质 ($q = -|e|$) 的情形。图 2 有如下特征。

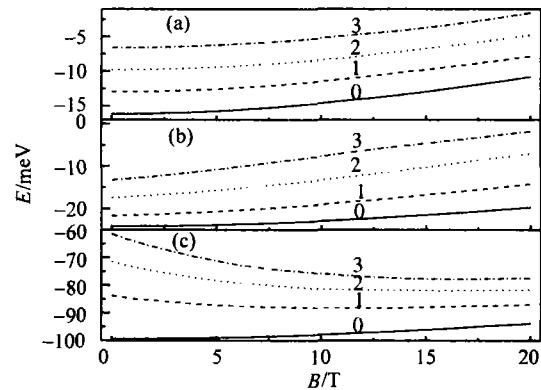


图 2 重空穴 ($m_h^* = 0.377 m_e$) 激子 X 的能量 E 随 B 的变化

Fig.2 Evolution of the energy E of the heavy-hole ($m_h^* = 0.377 m_e$) exciton X as a function of B

(a) $q = 0$; (b) $q = 1$, $d = 0$; (c) $q = -1$, $d = 0$

图中数字表示态的角动量 L

(1) 图 2a 表明: 中性杂质 (或者无杂质) 时, E 随 B 的增加而增加。这是由于 H 中与 B 有关的正项处于主导地位。图 2a 与文献 [1] 的相应结果符合得相当好。

(2) 存在带电杂质时 (不管是正杂质还是负杂质), 与中性杂质相比较, 其相应的 E 都要降低 (参见图 2 的纵坐标的数值)。这主要是因为正杂质与激子中的电子互相吸引, 而与其空穴互相排斥, 从而使正杂质与电子之间平均距离小于正杂质与空穴之间的平均距离, 在数值绝对值上吸引库仑势 (负值) 大于排斥库仑势 (正值), 故 E 降低。同理, 可以解释负杂质时 E 降低的原因。

(3) 负杂质时 E 比正杂质时相应的 E 要低,

这主要由 H 中限制势 $(m^* \omega_0^2 r^2)/2$ 引起的。无杂质时, 电子与空穴互相吸引, 它们至抛物势中心的平均距离大致相等。施加负杂质时, 电子与负杂质互相排斥, 电子的平均距离增加, $(m_e^* \omega_0^2 r_e^2)/2$ (用 V_e 表示) 增加; 而空穴与负杂质互相吸引, 空穴的平均距离减小, $(m_h^* \omega_0^2 r_h^2)/2$ (用 V_h 表示) 减小。同理可知, 施加正杂质时, V_e 减小, 而 V_h 增加。再根据 $m_h^* > m_e^*$ 可得, 负杂质时 V_e 增加得少, V_h 减小得多; 正杂质时 V_e 减小得少, V_h 增加得多, 因此, 负杂质时的 E 比正杂质时的 E 要低。至于相互作用能, 由于负杂质时 $h-q$ ($e-q$) 与正杂质时 $e-q$ ($h-q$) 的吸收 (排斥) 能在数值绝对值上增加 (减小) 得大致一样多, 故没有考虑相互作用能。

(4) 对于正杂质, E 曲线随 B 增加而上升。对于负杂质, $L=0$ 时, E 曲线上升; $L=1, 2, 3$ 时, E 曲线先下降后上升。下面解释 $L=1, 2, 3$ 时 E 曲线先下降后上升的原因。因为 $\omega_{ec} > \omega_{hc}$, 所以 $|\omega_{ec} L_e/2| > |\omega_{hc} L_h/2|$ 。对于负杂质, L_e 因 $e-q$ 排斥而变大, L_h 因 $h-q$ 吸引而变小, 故 B 较小时 $-\omega_{ec} L_e/2$ 处于主要地位, E 随 B 增加而减小; B 较大时, 正项 $(m_e^* \omega_{ec}^2 r_e^2)/8$ 和 $(m_h^* \omega_{hc}^2 r_h^2)/8$ 处于主要地位, 因为它们与 B^2 成正比, 从而 E 随 B 增加而增加。

(5) 基态不发生跃迁, 都为 $L=0$ 。

对于轻空穴 (取其有效质量 $m_h^* = 0.090 m_e$), 激子 X 的能量 E 随 B 的变化如图 3 所示。图 3 的特征与图 2 基本相同, 不同之处: ① 对于负杂质, 基态发生跃迁 (图 3c), 其 L 从 0 变为 1。② 图 3

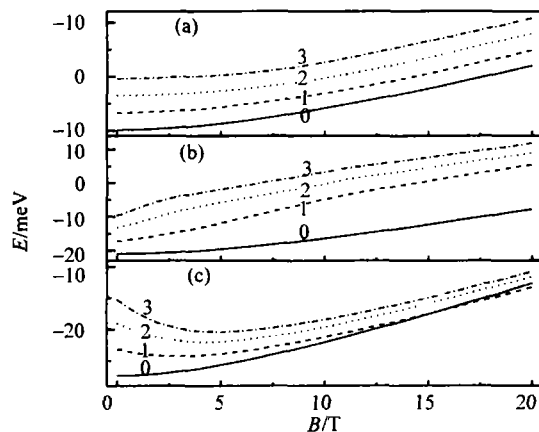


图 3 轻空穴 ($m_h^* = 0.090 m_e$) 激子的能量 E 随 B 的变化
Fig.3 Evolution of the energy of the light-hole ($m_h^* = 0.090 m_e$) exciton as a function of B

(a) $q=0$; (b) $q=1, d=0$; (c) $q=-1, d=0$

图中数字表示态的角动量 L

的 E 比图 2 相应的 E 要大 (参见纵坐标的数值)。由此推出: E 随空穴质量增加而减小。图 4 证明了这一推论。

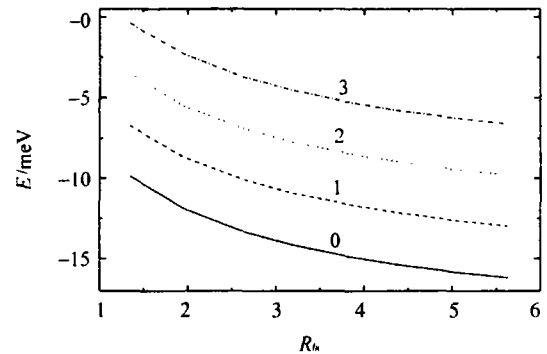


图 4 $B=0$ 和 $q=0$ 时, 激子 X 的能量 E 随 R_h 的变化
Fig.4 Evolution of the energy E of the exciton X as a function of R_h in the case of $B=0$ and $q=0$

图中数字表示态的角动量 L ; $R_h = m_h^*/m_e^*$

杂质的位置效应如图 5 所示。图 5b 和 c 显示: 对于带电杂质, d 较小时, E 随 d 增加而急剧增加; d 较大时, d 效应几乎为零, E 随 d 增加而基本不变, 且逼近与无杂质时的 E (参见图 5a)。由此可见, d 较小时, 势能 V_{eq} (对于正杂质) 和 V_{hq} (对于负杂质) 占主导地位, 随着 d 的增加, 则退居次要地位。

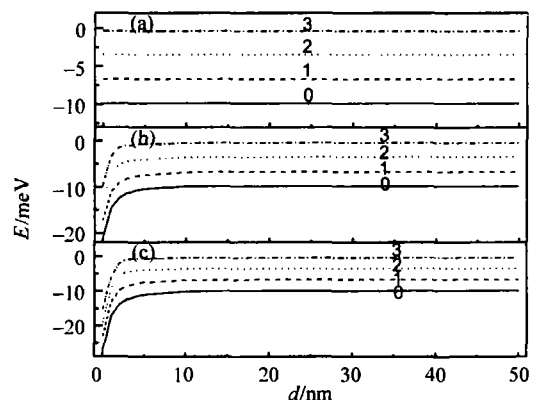


图 5 轻空穴 ($m_h^* = 0.090 m_e$) 激子 X 的能量 E 随 d 的变化

Fig.5 Evolution of the energy E of the light-hole ($m_h^* = 0.090 m_e$) exciton X as a function of d

(a) $q=0, B=0$; (b) $q=1, B=0$; (c) $q=-1, B=0$.

图中数字表示态的角动量 L

3 总 结

上面讨论了激子低态能谱的磁场和杂质效应。当没有杂质时, 激子 X 的低态能量随 B 的增加而增加; 对于正杂质, 能量曲线随 B 增加而上升; 对于负杂质, $L=0$ 时, 能量曲线上升; $L=1, 2,$

3时, 能量曲线先下降后上升。对于带电杂质, 与中性杂质比较, 其相应的能量都要降低。带电杂质的位置效应: d 较小时, 能量随 d 增加而急剧增加; d 较大时, 能量随 d 增加而基本不变。

至于激子中电子和空穴的关联, 与电子型量子点一样, 也可以通过体密度函数形象地将之显示出来。例如, 激子 X 的粒子关联如图6所示。图6是在 $q = 0$ 、 $B = 0$ 、 $L = 1$ 和重空穴 ($m_h^* = 0.377m_e$) 的条件下得出的, 显示在 $x-y$ 平面的上半部里电子的二体密度 ρ_2 随 r_2 的变化, 空穴被固定在 x 轴上其最大几率处 (在图中用白圈标示, 白圈的坐标为 $X_2 = 9.248$, $Y_2 = 0$)。图6表明: 电子的波函数主要分布在空穴周围。这是电子和空穴互相吸引而引起的。

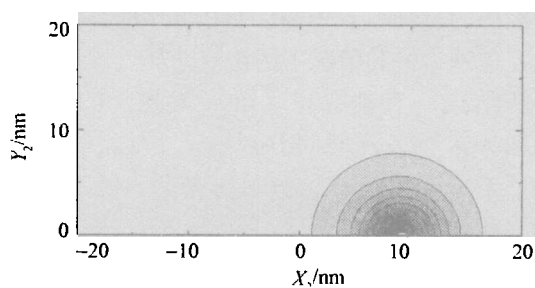


图6 在 $x-y$ 平面上半部, 激子 x 的 ρ_2 随 r_2 的变化
Fig.6 Evolution of ρ_2 of the exciton X as a function of r_2 in the upper part of $x-y$ plane
在越黑的区域中 ρ_2 的值越大。(X_2 , Y_2) = r_2

参考文献:

- [1] PATTON B, LANGBEIN W, WOGGON U. Trion, biexciton, and exciton dynamics in single self-assembled CdSe quantum dots[J]. Physical Review B, 2003, 68(12): 125316.
- [2] HALONEN V, CHAKRABORTY, PIETILAINEN. Excitons in a parabolic quantum dot in magnetic fields [J]. Physical Review B, 1992, 45(11): 5980 - 5985.
- [3] XIE W F. Energy spectra of excitons bound to a neutral acceptor in quantum dots [J]. Communications in Theoretical Physics, 2004, 41(1): 127 - 130.
- [4] XIAO Z G. Exciton binding energy in spherical quantum dots in a magnetic field [J]. Journal of Applied Physics, 1999, 86 (8): 4509 - 4514.
- [5] KLEINMAN D A. Binding energy of biexcitons and bound excitons in quantum wells [J]. Physical Review B, 1983, 28: 871 - 879.
- [6] BARTICEVIC Z, PACHECO M, DUQUE C A, et al. Magnetic-field effects on excitons trapped in quantum dots/interface defects in narrow quantum wells [J]. Physical Review B, 2003, 68(7): 073312.
- [7] HUI P. Effect of dielectric constant on the exciton ground state energy of CdSe quantum dots [J]. Chinese Physics, 2000, 9 (11): 844 - 847.
- [8] PAN H. Quantum-confinement effects on binding energies and optical properties of excitons in quantum dots [J]. Chinese Physics Letters, 2004, 21 (1): 160 - 163.
- [9] LIU Y M, HUANG G M, BAO C G. Phase diagram of a three-electron quantum dot with an impurity [J]. Physical Review B, 2004, 70: 073313 (4 pages)
- [10] 刘益民, 黄钢明, 鲍诚光. 带电杂质对磁场中3个电子量子点的影响[J]. 中国科学(C辑), 2004(4): 361 - 369.

Effect of a Magnetic Field and an Impurity on the Low-lying Energy Spectra of an Exciton

LIU Yi-min¹, HUANG Gang-ming², BAO Cheng-guang²

(1. Department of Physics, Shaoguan College, Shaoguan 512005, China;

2. Department of Physics, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: Effect of a magnetic field B and an impurity on the low-lying energy spectra of a two-dimensional exciton is studied. The impurity is located at the z -axis by a distance d from the plane of the exciton. The evolution of the low-lying energy E of the exciton in accord with B and d is obtained by exact diagonalization. When d is fixed, the increase of B leads to an increase of E in the cases of a neutral impurity (i.e. the impurity is absent) and a positive impurity. For a negative impurity, the increase of B leads to a monotone increase of E if angular momentum L is equal to 0. However, it leads firstly to a decrease when B is smaller and then an increase when B is larger if L is equal to 1, 2 and 3. When B is fixed, E increases rapidly at first and then is almost unchanged with the increase of d .

Key words: exciton; magnetic field; impurity; spectra