

# 准二维强耦合激子有效质量的温度依赖性

额尔敦朝鲁<sup>1</sup> 于若蒙<sup>2</sup>

(<sup>1</sup>河北科技师范学院凝聚态物理研究所, 河北 秦皇岛 066004; <sup>2</sup>华中科技大学物理系, 湖北 武汉 430074)

**摘要** 采用 Tokuda 改变的线性组合算符法和改进的 Lee-Low-Pines 变换法, 研究了温度对量子阱中电子(空穴)与界面光学(IO)声子强耦合又与体纵光学(LO)声子弱耦合激子的有效质量的影响。结果表明, 由电子(空穴)-体纵光学声子弱耦合所产生的激子有效质量( $M_{\text{ex-LO}}^*$ )随量子阱宽  $N$  的增加而增大、随电子与空穴间相对距离  $\rho$  的增加而先增大后缓慢减小再趋于稳定, 温度  $T$  对  $M_{\text{ex-LO}}^*$  及其随  $N$  和  $\rho$  变化的规律产生显著影响, 同时,  $M_{\text{ex-LO}}^*$  随  $T$  的变化也强烈的受到量子尺寸效应的影响; 由电子(空穴)-界面光学声子强耦合所产生的激子有效质量  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $N$  的增加而减小、随  $T$  的升高而增大、随  $\rho$  的增加而先增大后缓慢减小再趋于稳定, 但  $T$  对  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $N$  和  $\rho$  变化的规律无明显影响。

**关键词** 凝聚态光学性质; 激子; 线性组合算符法; 有效质量; 温度依赖性

中图分类号 O471.4 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20092904.1105

## Temperature Dependence of Quasi-Two-Dimensional Strong-Coupling Excitons' Effective Mass

Eerdunchaolu<sup>1</sup> Yu Ruomeng<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Condensed Matter Physics, Hebei Normal University of Science & Technology, Qinhuangdao, Hebei 066004, China

<sup>2</sup> Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074, China

**Abstract** The influences of the temperature on the effective mass of the exciton, for which the electron (hole) is strongly coupled with interface-optical phonons but weakly coupled with bulk-longitudinal-optical phonons in a quantum well, are studied by means of Tokuda's improved linear combination operator and a modified Lee-Low-Pines transformation method. The results indicate that the effective mass ( $M_{\text{ex-LO}}^*$ ) of the exciton, which is induced by the electron (hole) weakly coupled with bulk-longitudinal-optical phonons, will increase with the well width ( $N$ ) increasing and first increase and then decrease, finally tends to a stable value with the distance between the electron and the hole ( $\rho$ ) increasing. The influence of temperature on  $M_{\text{ex-LO}}^*$  and its changing with  $N$  and  $\rho$  is obvious. The change of  $M_{\text{ex-LO}}^*$  with  $T$  is strongly related to the quantum-size effect. The effective mass  $M_{\text{ex-IO}}^*$  of the exciton, which is induced by the electron (hole) strongly coupled with interface-optical phonons, will decrease with increasing  $N$ , increase with increasing  $T$  and first increase and then decrease, finally tends to a stable value with increasing  $\rho$ . But the influence of temperature on  $M_{\text{ex-IO}}^*$  and its changing with  $N$  and  $\rho$  is not obvious.

**Key words** optical properties of condensed matter; exciton; linear combination operator method; effective mass; temperature dependence

## 1 引 言

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<sup>[1~5]</sup>。量子阱和超晶

格是一种准二维(Quasi-two-dimensional, Q2D)系统, 激子-声子耦合是该系统内的一个主要相互作用。因而, 近年来人们对 Q2D 系统中激子-声子系统的性质已被相当深入的研究<sup>[6~13]</sup>。然而, 迄今为

收稿日期: 2008-08-03; 收到修改稿日期: 2008-10-08

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

作者简介: 额尔敦朝鲁(1960-), 男, 教授, 主要从事凝聚态光学性质方面的研究。Email: eerdunchaolu@sohu.com

止,关于 Q2D 激子的工作大多都集中在激子-声子弱、中耦合和零温(0 K)极限情形。弱耦合理论对 III-V 族化合物材料无疑是正确的。但随着分子束外延等高新技术的发展,近年来,II-VI 族化合物材料因其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<sup>[1]</sup>而被广泛注意。不过,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,以至弱、中耦合理论不再适用<sup>[14]</sup>。本文采用 Tokuda 改变的线性组合算符法和

改进的 Lee-Low-Pines(LLP)变换法,研究了温度对量子阱中电子(空穴)与界面光学(IO)声子强耦合又与体纵光学(LO)声子弱耦合激子有效质量的影响。

## 2 理论方法

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,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<sup>[7,8]</sup>

$$H = \frac{P_{z_e}^2}{2m_e} + \frac{P_{z_h}^2}{2m_h} + \frac{P_R^2}{2M} + \frac{p_\rho^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty 1}[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + \sum_{k,m,p} a_{k,m,p}^+ a_{k,m,p} \hbar\omega_{LO} + \sum_{q,p} b_{q,p}^+ b_{q,p} \hbar\omega_{s,p} + \sum_{k,m,p} \{B^* [W_{k,m,p}(z_e, z_h, \rho) a_{k,m,p}^+] e^{-ik \cdot R} + H \cdot c\} + \sum_{q,p} \left[ \frac{\sinh(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-qd} \{C^* [V_{q,p}(z_e, z_h, \rho) b_{q,p}^+] e^{-iq \cdot R} + H \cdot c\}, \quad (1a)$$

式中

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

$$\omega_{s,\pm}^2 = \omega_{TO}^2 \frac{(\epsilon_{01} + \epsilon_{02}) \mp (\epsilon_{01} - \epsilon_{02}) \exp(-2qd)}{(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2}) \mp (\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}) \exp(-2qd)}, \quad \omega_{LO} = \frac{\epsilon_{01}}{\epsilon_{\infty 1}} \omega_{TO}, \quad (1c)$$

$$V_{q,\pm}(z_e, z_h; \rho) = G_{\pm}(q, z_e) \exp(-is_2 \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}) - G_{\pm}(q, z_h) \exp(is_1 \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}), \quad (1d)$$

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

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

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

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

$$V_e(z_e) = \begin{cases} V_{\text{img}}(z_e), & |z_e| \leq d \\ V_{\text{img}}(z_e) + V_0, & |z_e| > d \end{cases}, \quad V_h(z_h) = \begin{cases} V_{\text{img}}(z_h), & |z_h| \leq d \\ V_{\text{img}}(z_h) + V'_0, & |z_h| > d \end{cases}, \quad (1i)$$

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

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

这里,  $m_e, m_h$  和  $\mathbf{r}_e = (\boldsymbol{\rho}_e, z_e), \mathbf{r}_h = (\boldsymbol{\rho}_h, z_h)$  分别表示电子与空穴的带质量和空间坐标,  $\mathbf{R} = s_1 \boldsymbol{\rho}_e + s_2 \boldsymbol{\rho}_h (s_1 =$

$m_e/M, s_2 = m_h/M$ 、 $\mathbf{P}_R$  和  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_h$ 、 $\mathbf{P}_p$  分别表示体系质心运动与相对运动的坐标和动量,  $M = m_e + m_h$ ,  $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ 。  $a_{k,m,p}^+$  ( $a_{k,m,p}$ ) 是频率为  $\omega_{LO}$ , 波矢为  $(\mathbf{k}, k_m)$ , 宇称为  $p$  的 LO 声子的产生(湮灭)算符,  $b_{q,p}^+$  ( $b_{q,p}$ ) 表示频率为  $\omega_{s,p}$ , 波矢为  $\mathbf{q}$  的 IO 声子产生(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  $k_z = m\pi/2d$  ( $m = 1, 2, \dots, N/2$ ),  $N = 2d/a$ ,  $a$  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。 $\Omega$  和  $A$  分别表示量子阱的体积和界面积。

效仿 Tokuda<sup>[15]</sup> 引入产生算符  $B^+$  和湮灭算符  $B$ , 并用其线性组合表示激子的质心动量和质心坐标:

$$P_{Rj} = \left(\frac{M\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} (B_j + B_j^+ + p_{0j}), \quad R_j = i\left(\frac{\hbar}{2M\lambda}\right)^{1/2} (B_j - B_j^+), \quad (j = x, y), \quad (2)$$

其中  $\lambda$  和  $\mathbf{p}_0$  为变分参数。为了求有限温度下量子阱中激子的有效质量, 讨论算符函数  $J = U_2^{-1} U_1^{-1} (H - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{\parallel T}) U_1 U_2$  在  $|\Phi\rangle$  态中的期待值

$$\bar{J} = \langle \Phi | U_2^{-1} U_1^{-1} (H - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{\parallel T}) U_1 U_2 | \Phi \rangle \quad (3)$$

的极值问题, 按变分原理

$$\delta \bar{J} = \delta [\langle \Phi | U_2^{-1} U_1^{-1} (H - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{\parallel T}) U_1 U_2 | \Phi \rangle] = 0, \quad (4)$$

这里

$$\mathbf{P}_{\parallel T} = \mathbf{P}_R + \sum_{k,m,p} \hbar \mathbf{k} a_{k,m,p}^+ a_{k,m,p} + \sum_{q,p} \hbar \mathbf{q} b_{q,p}^+ b_{q,p} \quad (5)$$

是系统的总动量算符,  $\mathbf{u}$  是 Lagrange 乘数因子, 以后将看到它代表激子质心的平动速度。

$$U_1 = \exp\left[-i\left(\sum_{k,m,p} A_1 a_{k,m,p}^+ a_{k,m,p} \mathbf{k} + \sum_{q,p} A_2 b_{q,p}^+ b_{q,p} \mathbf{q}\right) \cdot \mathbf{R}\right] \quad (6)$$

是改进的 Lee-Low-Pines(LLP) 变换, 其中  $A_i$  ( $i=1, 2$ ) 是表征激子-声子耦合程度的物理量, 对于研究的激子与界面光学声子强耦合、与 LO 声子弱耦合体系,  $A_1 = 1$  和  $A_2 = 0$ <sup>[15,16]</sup>。

$$U_2 = \exp\left\{\sum_{k,m,p} [f_{k,m,p}(z_e, z_h, \rho) a_{k,m,p}^+ - f_{k,m,p}^*(z_e, z_h, \rho) a_{k,m,p}] + \sum_{q,p} (g_{q,p} b_{q,p}^+ - g_{q,p}^* b_{q,p})\right\} \quad (7)$$

是改进的第二 LLP 变换<sup>[15,16]</sup>, 其中,  $f_{k,m,p}$  ( $f_{k,m,p}^*$ ) 和  $g_{q,p}$  ( $g_{q,p}^*$ ) 都是变分参量, 它们由  $\bar{J}$  的极值条件来确定。

$$|\Phi\rangle = |\phi(\rho, \xi)\rangle |\psi(z_e, z_h)\rangle |\{n_j\}\rangle |\{n_k\}\rangle |\{n_{q,p}\}\rangle \quad (8)$$

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,  $|\psi(z_e, z_h)\rangle$  为电子和空穴在  $z$  方向移动的本征函数。在无限高势阱近似下, 根据文献[7]和[8],  $|\phi(\rho, \xi)\rangle$  为二维类氢原子系的波函数,  $|\psi(z_e, z_h)\rangle$  为一维无限深方势阱中运动的电子-空穴两体的波函数

$$|\phi_{n,l}(\rho, \xi)\rangle = \frac{e^{i\varphi}}{(2\pi)^{1/2}} R_{n,l} [2/(n+1/2)a'_0], \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots; l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n.) \quad (9)$$

$$|\psi_{l_1, l_2}(z_e, z_h)\rangle = \begin{cases} \frac{1}{d} \sin\left[\frac{\pi l_1(z_e + d)}{2d}\right] \sin\left[\frac{\pi l_2(z_h + d)}{2d}\right], & (|z_e|, |z_h| \leq d,) \\ 0, & (|z_e|, |z_h| > d,) \quad (l_1, l_2 = 1, 2, 3, \dots, N) \end{cases} \quad (10)$$

$a_0 = \xi a'_0 = \epsilon_{\infty 1} \hbar^2 / \mu e^2$  为类氢原子的玻尔半径;  $|\{n_j\}\rangle$ ,  $|\{n_k\}\rangle$  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[17]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

$$\bar{n} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\lambda}{k_B T}\right) + 1\right]^{-1}, \quad \bar{n}_k = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1\right]^{-1}, \quad \bar{n}_{q,p} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{s,p}}{k_B T}\right) - 1\right]^{-1}. \quad (11)$$

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

将把(1)式、(2)式和(5)-(11)式代入(3)式, 得

$$\bar{J} = \langle \phi(\rho, \xi) | \langle \psi(z_e, z_h) | F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda, \mathbf{p}_0) | \psi(z_e, z_h) \rangle | \phi(\rho, \xi) \rangle, \quad (12)$$

式中

$$F(f_{k,m,p}, f_{k,m,p}^*, g_{q,p}, g_{q,p}^*, \lambda, \mathbf{p}_0) = \langle \{n_{q,p}\} | \langle \{n_k\} | \langle \{n_j\} | U_2^{-1} U_1^{-1} (H - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{\parallel T}) U_1 U_2 | \{n_j\} \rangle | \{n_k\} \rangle | \{n_{q,p}\} \rangle =$$

$$\begin{aligned}
& \frac{P_{z_e}^2}{2m_e} + \frac{P_{z_h}^2}{2m_h} + \frac{p_\rho^2}{2\mu} - \frac{\xi e^2}{\epsilon_{\infty 1} \rho} + \frac{\hbar \lambda}{4} p_0^2 + V_e(z_e) + V_h(z_h) - \left(\frac{M\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{p}_0 \\
& + \left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right)\hbar\lambda + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} \bar{n}_k (k^2 + u_l^2) + \sum_{q,p} \mathbf{n}_{q,p} \hbar\omega_{s,p} - \sum_{q,p} \hbar \mathbf{u} \cdot \mathbf{q} |g_{q,p}|^2 \\
& + \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k,m,p} k^2 |f_{k,m,p}|^2 (4\bar{n}_k + 1) + \sum_{k,m,p} \hbar\omega_{\text{LO}} |f_{k,m,p}|^2 + \sum_{q,p} \hbar\omega_{s,p} |g_{q,p}|^2 \\
& + \left[ \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{k,m,p} (\nabla_{ez} f_{k,m,p}) (\nabla_{ez} f_{k,m,p}^*) + \frac{\hbar^2}{2m_h} \sum_{k,m,p} (\nabla_{hz} f_{k,m,p}) (\nabla_{hz} f_{k,m,p}^*) \right] (2\bar{n}_k + 1) \\
& + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{k,m,p} (\nabla_\rho f_{k,m,p}) (\nabla_\rho f_{k,m,p}^*) (2\bar{n}_k + 1) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{q,p} (\nabla_\rho g_{q,p}) (\nabla_\rho g_{q,p}^*) (2\bar{n}_{q,p} + 1) \\
& + \sum_{k,m,p} \{B^* [W_{k,m,p}(z_e, z_h, \rho) f_{k,m,p}^*] + H.c.\} - \frac{\hbar}{M} \left(\frac{M\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} \sum_{k,m,p} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{k} |f_{k,m,p}|^2 \\
& + \sum_{q,p} \left[ \frac{\sinh(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-q|z|} \{C^* [V_{q,p}(z_e, z_h, \rho) g_{q,p}^*] D(\bar{n}, q) e^{-\frac{\hbar q^2}{4M\lambda}} + H.c.\} \quad (13)
\end{aligned}$$

称为变分函数,在上式推导中忽略了多声子之间相互作用引起的小项和波矢高阶小项的贡献,式中

$$\begin{aligned}
D(\bar{n}, q) &= \langle \{n_j\} | \exp\left[-\left(\frac{\hbar q^2}{4M\lambda}\right)^{1/2} \sum_j B_j q_j\right] \exp\left[\left(\frac{\hbar q^2}{4M\lambda}\right)^{1/2} \sum_j B_j^+ q_j\right] | \{n_j\} \rangle = \\
& 1 - \bar{n} \frac{\hbar q^2}{2M\lambda} + O\left(\frac{\hbar q^2}{2M\lambda}\right)^2. \quad (14)
\end{aligned}$$

而参数  $\xi$  可采用“自洽法”由下式确定<sup>[7]</sup>:

$$\langle \varphi(\rho, \xi) \psi(z_e, z_h) | \frac{e^2}{\epsilon_{\infty 1}} \left[ \frac{\xi}{\rho} - \frac{1}{[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} \right] | \psi(z_e, z_h) \varphi(\rho, \xi) \rangle = 0. \quad (15)$$

将式(10)、(12)和(13)代入式(4),可确定变分参量  $f_{k,m,t}$  ( $f_{k,m,t}^*$ ),  $g_{q,p}$  ( $g_{q,p}^*$ ),  $\lambda$  和  $\mathbf{p}_0$ 。若将这些变分参量代入下列计算体系动量期待值的公式中,可进一步得到激子的有效质量

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{P}}_{\parallel T} &= \langle \psi(z_e, z_h) | \langle \{n_{q,p}\} | \langle \{n_k\} | \langle \{n_j\} | U_2^{-1} U_1^{-1} \mathbf{P}_{\parallel T} U_1 U_2 \cdot \\
& | \{n_j\} \rangle | \{n_k\} \rangle | \{n_{q,p}\} \rangle | \psi(z_e, z_h) \rangle = M_{\text{ex-ph}}^* \mathbf{u}. \quad (16)
\end{aligned}$$

可见 Lagrange 乘数因子  $\mathbf{u}$  正是激子质心平动的速度,而  $M_{\text{ex-ph}}^*$  是激子质心的有效质量,由两部分组成:

$$M_{\text{ex-ph}}^* = M_{\text{ex-LO}}^* + M_{\text{ex-IO}}^*, \quad (17)$$

其中

$$\begin{aligned}
M_{\text{ex-LO}}^* &= M \left\{ \left[ 1 - \frac{16\alpha}{\pi du_l} \right] \left[ \frac{3}{8} I_1 + \frac{1}{4} \sum_{m=2,3,4,\dots}^{N/2} I_2(m) - \frac{32}{\pi^2} \sum_{m=1,3,5,\dots}^{N/2} \frac{1}{m^2 (4-m^2)^2} I_3(m, \rho) \right] + \right. \\
& \frac{\pi}{2} \frac{M}{\mu} \frac{\alpha}{(du_l)^3} (2\bar{n}_k + 1) \left( \frac{1}{2} I_4 + \sum_{m=2,3,4,\dots}^{N/2} m I_5(m) \right) + \frac{8\alpha}{\pi du_l} \frac{M}{\mu} (2\bar{n}_k + 1) \times \\
& \left. \left[ \frac{3(s_1^2 + s_2^2)}{8} I_6 + \frac{s_1^2 + s_2^2}{4} \sum_{m=2,3,4,\dots}^{N/2} I_7(m) + \sum_{m=1,3,5,\dots}^{N/2} \left( \frac{8}{\pi m (4-m^2)^2} \right)^2 s_1 s_2 I_8(m, \rho) \right] \right\}, \quad (18)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_{\text{ex-IO}}^* &= 16\alpha\epsilon_{01}\epsilon_{\infty 1} (du_l)^3 M \int_0^\infty x^2 \left[ 1 - \bar{n} \frac{2\omega_{\text{LO}} x^2}{(du_l)^2 \lambda} \right] e^{-2x} e^{-\frac{\omega_{\text{LO}} x^2}{(du_l)^2 \lambda}} \left\{ \frac{\tanh x}{\epsilon_-(x) (du_{s,+})^6} \times \right. \\
& \left. \left[ \frac{1}{2} + \left( \frac{1}{4x} - \frac{x}{(2x)^2 + \pi^2} \right) \sinh 2x - \frac{\pi^4 \sinh^2 x J_0^{(q)}(x, \rho)}{x^2 (x^2 + \pi^2)^2} \right] + \right. \\
& \left. \frac{c \tanh x}{\epsilon_+(x) (du_{s,-})^6} \left[ -\frac{1}{2} + \left( \frac{1}{4x} - \frac{x}{(2x)^2 + \pi^2} \right) \sinh 2x \right] \right\} dx. \quad (19)
\end{aligned}$$

在以上推导中假定体系处于  $z$  方向运动的基态 ( $l_1 = 1, l_2 = 1$ ), 式中,

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{x}{\left[ x + \left( \frac{\pi}{2du_l} \right)^2 \right] [x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^3} dx, \quad I_2(m) = \int_0^\infty \frac{x}{\left[ x + \left( \frac{m\pi}{2du_l} \right)^2 \right] [x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^3} dx, \quad (20)$$

$$I_3(m, \rho) = \int_0^{\infty} \frac{J_0^{(k)}(x, \rho)x}{\left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_l}\right)^2\right][x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^3} dx, \quad I_4 = \int_0^{\infty} \frac{x}{\left[x + \left(\frac{\pi}{2du_l}\right)^2\right][x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^4} dx, \quad (21)$$

$$I_5(m) = \int_0^{\infty} \frac{x}{\left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_l}\right)^2\right][x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^4} dx, \quad I_6 = \int_0^{\infty} \frac{x^2}{\left[x + \left(\frac{\pi}{2du_l}\right)^2\right][x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^4} dx, \quad (22)$$

$$I_7(m) = \int_0^{\infty} \frac{x^2}{\left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_l}\right)^2\right][x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^4} dx, \quad I_8(m, \rho) = \int_0^{\infty} \frac{x^2 J_0^{(k)}(x, \rho)}{\left[x + \left(\frac{m\pi}{2du_l}\right)^2\right][x(4\bar{n}_k + 1) + 1]^2} dx, \quad (23)$$

$\varepsilon_{\mp}(x) = [\varepsilon_{\infty 1} + \varepsilon_{\infty 2} \mp (\varepsilon_{\infty 1} - \varepsilon_{\infty 2})e^{-2x}]^{3/2} [\varepsilon_{01} + \varepsilon_{02} \mp (\varepsilon_{01} - \varepsilon_{02})e^{-2x}]^{1/2}$ ,  $J_0^{(k)}(x, \rho)$  和  $J_0^{(q)}(x, \rho)$  是零阶的 Bessel 函数,  $\alpha = (Me^2/\hbar^2 u_l)(1/\varepsilon_{\infty 1} - 1/\varepsilon_{01})$ ,  $\hbar^2 u_l^2/2M = \hbar\omega_{LO}$ .

### 3 数值分析与讨论

由(17)式-(19)式可以看出,量子阱中激子的有效质量  $M_{e-ph}^*$  由两部分组成:1) 电子(空穴)与 LO 声子弱耦合所产生的激子有效质量  $M_{ex-LO}^*$ ;2) 电子(空穴)与 IO 声子强耦合所产生的激子有效质量  $M_{ex-IO}^*$ 。为了更清楚地说明温度对量子阱中激子有效质量的影响。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<sup>[18,19]</sup>,数值结果分别示于图 1—图 4,图中以  $M$  作为质量单位、以晶格常数  $a$  作为阱宽  $N$  和电子-空穴间距  $\rho$  的单位。

表 1 材料的特征参数

Table 1 Characteristic parameters of material

material	$\varepsilon_{\infty}$	$\varepsilon_0$	$m_e/m_0$	$m_h/m_0$	$\hbar\omega_{LO}/\text{meV}$	$\hbar\omega_{TO}/\text{meV}$
AgBr	4.62	12.44	0.215	0.52	17.07	11.35
AgCl	3.97	9.5	0.302	—	23.02	14.88

由图 1 可以看出,  $M_{ex-LO}^*$  随  $N$  的增加而增大,这是因为随着阱宽的增加,激子周围的 LO 声子数将增多,进而导致了  $M_{ex-LO}^*$  增大。另外,  $M_{ex-LO}^*$  随  $N$  的增加而增大的过程中,当  $N$  较小(窄阱)时,  $M_{ex-LO}^*$  的取值出现了明显的上下起伏或振荡,但随着  $N$  的增加,这种振荡逐渐消失,显然,这是一种量子尺寸效应。从图 1 不难发现,  $M_{ex-LO}^*$  随  $N$  的变化规律受到  $T$  的显著影响,与此同时,  $M_{ex-LO}^*$  随  $T$  的变化规律也强烈的受到  $N$  的影响:首先,温度的升高明显削弱了  $M_{ex-LO}^*$  随  $N$  的增加而增大的幅度,导致了一些较高温度下的  $M_{ex-LO}^*-N$  曲线与各较低温度下的  $M_{ex-LO}^*-N$  曲线相交。这一结果表明,激子-LO 声子弱相互作用的机制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;其次,  $M_{ex-LO}^*$  随  $T$  的升高而增大或减小,则取决于阱宽  $N$  的大小,对于窄阱(如  $N < 18$ )而言,  $M_{ex-LO}^*$  随  $T$  的升高而增大,而当阱宽较大时,  $M_{ex-LO}^*$  随  $T$  的升高而减小。

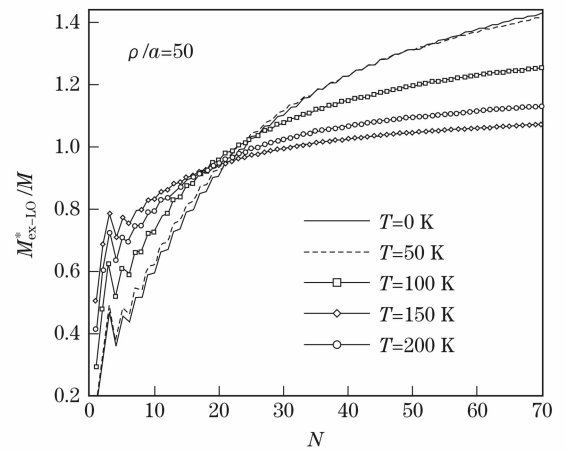


图 1 电子(空穴)与 LO 声子弱耦合产生的激子有效质量  $M_{ex-LO}^*$  随量子阱宽度  $N$  和温度  $T$  的变化

Fig. 1 The variation of the effective mass  $M_{ex-LO}^*$  of the exciton, which is induced by the electron (hole) weakly coupled with LO phonons, with well widths  $N$  and temperature  $T$

从图 2 可以看出,当  $\rho$  较小( $\rho < 4a_0$ )时,  $M_{ex-LO}^*$  随  $\rho$  的增加而迅速增大,并达到一个最大值,然后随着  $\rho$  的增加而缓慢减小再趋于稳定。从图 2 也不难发现,温度  $T$  对  $M_{ex-LO}^*$  随  $\rho$  的变化有较大影响,温度的升高明显削弱  $M_{ex-LO}^*$  随  $\rho$  的增加而增大或减小的幅度。

从图 3 可以看出,  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $N$  的增加而迅速减小, 这表明 IO 声子效应只对窄阱中激子有效质量的影响较大。从图 3 还可以看出,  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $T$  的升高而增大, 这说明激子-IO 声子强耦合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 声子强相互作用所导致的激子能谱的非抛物性的结果。

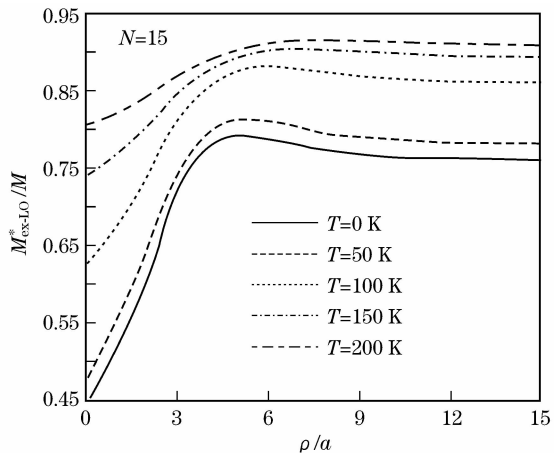


图 2 电子(空穴)与 LO 声子弱耦合产生的激子有效质量  $M_{\text{ex-LO}}^*$  随电子与空穴间相对距离  $\rho$  和温度  $T$  的变化

Fig. 2 The variation of the effective mass  $M_{\text{ex-LO}}^*$  of the exciton, which is induced by the electron (hole) weakly coupled with LO phonons, with the relative position between the electron and the hole  $\rho$  and the temperature  $T$

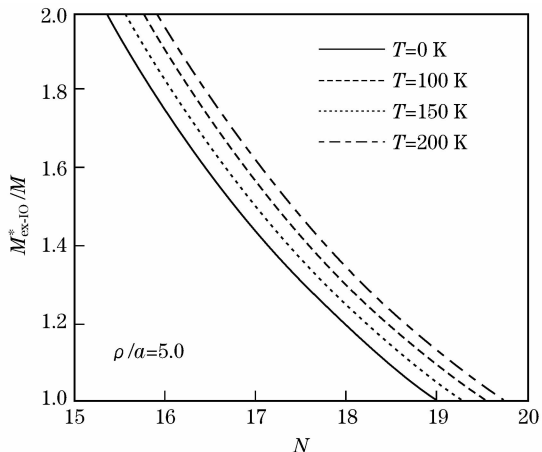


图 3 电子(空穴)与 IO 声子强耦合产生的激子有效质量  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随量子阱宽度  $N$  和温度  $T$  的变化

Fig. 3 The variation of the effective mass  $M_{\text{ex-IO}}^*$  of the exciton, which is induced by the electron (hole) strongly coupled with IO phonons, with well widths  $N$  and the temperature  $T$

从图 4 可以看出, 当  $\rho$  较小时,  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $\rho$  的增加而显著增大, 并在  $\rho \approx 13a_0$  处达到最大值, 然后随

$\rho$  的增加而缓慢减小, 再趋于稳定。从图 4 还可以看出,  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $T$  的升高而增大, 但  $T$  对  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $\rho$  的增加而增大或减小的幅度无明显影响, 因而不同温度  $T$  下的各个  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $\rho$  的变化规律基本相同。

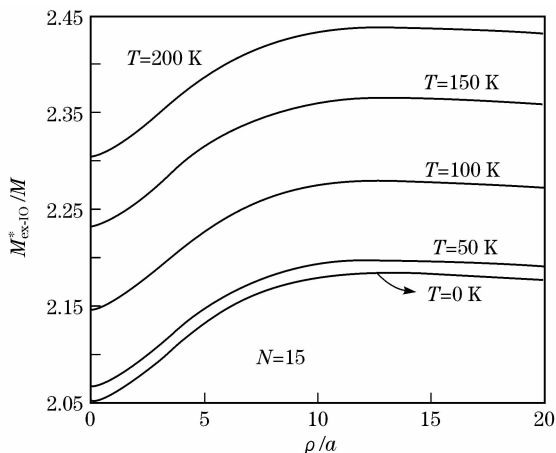


图 4 电子(空穴)与 IO 声子强耦合产生的激子有效质量  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随电子与空穴间相对距离  $\rho$  和温度  $T$  的变化

Fig. 4 The variation of the effective mass  $M_{\text{ex-IO}}^*$  of the exciton, which is induced by the electron (hole) strongly coupled with IO phonons, with the relative position between the electron and the hole  $\rho$  and the temperature  $T$

### 4 结 论

采用 Tokuda 改变的线性组合算符法和改进的 LLP 变分法, 研究了温度对量子阱中电子(空穴)与 IO 声子强耦合又与 LO 声子弱耦合激子有效质量的影响。不失严格性, 采用无限高方势阱模型, 推导出了作为量子阱宽度  $N$ 、电子与空穴间相对距离  $\rho$  和温度  $T$  的函数的激子有效质量的表达式。以 AgCl/AgBr/AgCl 量子阱为例进行了数值计算, 结果表明, 不同支声子与电子(空穴)相互作用所产生的激子有效质量以及它们随  $N$ 、 $\rho$  和  $T$  的变化情况大不相同: (1) 由电子(空穴)-LO 声子弱耦合所产生的激子有效质量  $M_{\text{ex-LO}}^*$  随  $N$  的增加而增大、随  $\rho$  的增加而先增大后缓慢减小再趋于稳定,  $T$  对  $M_{\text{ex-LO}}^*$  及其随  $N$  和  $\rho$  变化的规律产生显著影响, 同时,  $M_{\text{ex-LO}}^*$  随  $T$  的变化也强烈的受到量子尺寸效应的影响; (2) 由电子(空穴)-IO 声子强耦合所产生的激子有效质量  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $N$  的增加而减小、随  $T$  的升高而增大、随  $\rho$  的增加而先增大后缓慢减小再趋于稳定, 但  $T$  对  $M_{\text{ex-IO}}^*$  随  $N$  和  $\rho$  变化的规律无明显影响。

## 参 考 文 献

- 1 Zhang Xiqing, Mei Zengxia, Duan Ning *et al.*. Exciton optical properties of cdse/cdzns superlattices[J]. *Acta Optica Sinica.*, 2002, **22**(1): 114~117  
张希清, 梅增霞, 段宁等. CdSe/CdZnSe 超晶格的激子光学性质的研究 [J]. *光学学报*, 2002, **22**(1): 114~117
- 2 Yan Haiqing, Tang Chen, Zhang Hao *et al.*. The variable metric algorithm for ground state energy of ionized-donor-bound excitons in semiconductors[J]. *Acta Physica Sinica.*, 2004, **53**(11): 3877~3881  
闫海青, 唐晨, 张焱等. 半导体束缚激子基态能的变尺度法 [J]. *物理学报*, 2004, **53**(11): 3877~3881
- 3 Liu Jing, Sun Junqiang, Huang Dexiu *et al.*. Influence on resonant tunneling spectral character of two-dimensional magnetic optical quantum wells[J]. *Chin. J. Lasers*, 2007, **34**(5): 649~654  
刘靖, 孙军强, 黄德修等. 二维磁性光量子阱对共振隧穿光谱特性的影响 [J]. *中国激光*, 2007, **34**(5): 649~654
- 4 Zhang Shuang, Guo Shuxu, Gao Fengli *et al.*. Direct current and 1/f noise characteristics of ingaasp/gaas high power quantum well laser diodes[J]. *Chin. J. Lasers*, 2008, **34**(8): 1144~1148  
张爽, 郭树旭, 郭峰利等. 大功率 InGaAsP/GaAs 量子阱半导体激光器的直流和 1/f 噪声性质 [J]. *中国激光*, 2008, **34**(8): 1144~1148
- 5 Zhong Gaoyu, Lin Jian, Wang Meiliang *et al.*. Temperature-dependent luminescence originating from the recombination of excitons in organic light-emitting materials [J]. *Acta Optica Sinica.*, 2006, **26**(4): 585~590  
钟高余, 林剑, 王美良等. 有机材料激子发光的温度特性 [J]. *光学学报*, 2006, **26**(4): 585~590
- 6 Yao Ming, Zhu Kadi, Yuan Xiaozhong *et al.*. Effects of exciton-phonon interaction on third-order nonlinear optical properties[J]. *Acta Optica Sinica.*, 2006, **26**(4): 605~609  
姚鸣, 朱卡的, 袁晓众等. 激子声子相互作用对三阶非线性光学性质的影响 [J]. *光学学报*, 2006, **26**(4): 605~609
- 7 Miao Jingqi, Yang Qianli, Gu Shiwei. Exciton-phonon system in a polar semiconductor quantum well[J]. *Phys. Rev. B*, 1989, **40**: 9846~9857
- 8 Yang Qianli, Mao Jingqi, Gu Shiwei. Intermediate exciton in quantum well[J]. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 1989, **1**: 10343~10349
- 9 Chuu Dersan, Won Winlong, Pei Juihsiang. Longitudinal-optical-phonon effects on the exciton binding energy in a semiconductor quantum well[J]. *Phys. Rev. B*, 1994, **49**: 14554~14563
- 10 Zheng Ruisheng, Matsuura M. Exciton-phonon interaction effects in quantum wells[J]. *Phys. Rev. B*, 1997, **56**: 2058~2061
- 11 Gerlach B, Usthoﬀ J, Smondyrev M A. Ground-state energy of an exciton-(LO) phonon system in a parabolic quantum well[J]. *Phys. Rev. B*, 1999, **60**: 16569~16583
- 12 Zhang Hong, Liu Lei, Liu Jianjun. Binding energies of excitons in symmetrical GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As double quantum wells[J]. *Acta Physica Sinica.*, 2007, **56**(1): 487~490  
张红, 刘磊, 刘建军. 对称 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 双量子阱中激子的束缚能 [J]. *物理学报*, 2007, **56**(1): 487~490
- 13 Guo Z Z, Liang X X, Ban S L. Pressure-induced increase of exciton-LO phonon coupling in a ZnCdSe/ZnSe quantum well[J]. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 2003, **238**(1): 173~179
- 14 Pan Jinsheng. The surface or interface polaron in polar crystals [J]. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 1985, **127**: 307~318
- 15 Tokuda N. A variational approach to the polaron problem[J]. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1980, **13**: L851~855
- 16 Lee T D, Low F M, Pines D. The motion of slow electrons in a crystal[J]. *Phys. Rev.*, 1953, **90**: 297~302
- 17 Brummell M A, Nicholas R J, Hopkins M A *et al.*. Modification of the electron-phonon interactions in GaAs-GaAlAs heterojunctions[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**: 77~80
- 18 Albrich C, Bajaj K K. Binding energy of a Mott-Wannier exciton in a polarizable medium[J]. *Solid State Commun.*, 1997, **22**(2): 157~160
- 19 Balderschi A, Czaja W, Tosatti E *et al.*. The physics of latent image formation in silver halides [C]. *Singapore: World Scientific*, 1984, 1~22