

# ĐỘ TÁI CHUẨN HÓA CỦA KHE DẢI TRONG DÂY GIẾNG LƯỢNG TỬ ĐƯỢC KÍCH THÍCH QUANG HỌC

Đào Văn Cư

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên TP. Hồ Chí Minh

( Bài nhận ngày 30 tháng 5 năm 2001 )

**TÓM TẮT :** Chúng tôi nghiên cứu độ tái chuẩn hóa khe dải (BGR) của dây giếng lượng tử (QWW) được kích thích quang học bao gồm tương tác Coulomb của điện tử-lỗ trống và tương tác hạt tải với phonon quang học dọc (LO). Các kết quả tính số cho dây lượng tử GaAs trong phạm vi gần đúng giả tính chứng tỏ rằng ảnh hưởng của tương tác hạt tải-phonon trên BGR là nhỏ.

## 1. Mở đầu

Dưới kích thích laser mạnh lên các hệ bán dẫn, plasma điện tử-lỗ trống đậm đặc được hình thành, khi đó do các hiệu ứng tương quan trao đổi và sự chắn của tương tác Coulomb, nhiều tính chất đơn hạt bị tái chuẩn hóa, như độ tái chuẩn hóa khe dải (band gap renormalization-BGR). Dưới tác động của hiệu ứng này, dẫn đến hiệu ứng phi tuyến quang học, hay ảnh hưởng lên phổ hấp thụ và phát xạ quang học [1-3]. Vì thế mà BGR giữ vai trò quan trọng và được nhiều người quan tâm nghiên cứu. Để tính BGR chúng ta phải xác định thế chắn  $V_s(q, \omega)$ . Trong hình thức luận hàm điện môi, thế chắn cho bởi:  $V_s(q, \omega) = \frac{V(q)}{\epsilon(q, \omega)}$ , với  $V(q)$  là thế tương tác Coulomb trần,  $\epsilon(q, \omega)$  là hàm điện môi. Nhiều mô hình gần đúng khác nhau được sử dụng để khảo sát hàm điện môi  $\epsilon(q, \omega)$ . Gần đúng pha ngẫu nhiên (random phase approximation-RPA), hay gần đúng cực plasmon (plasmon pole approximation-PPA) đã được sử dụng để nghiên cứu BGR cho các hệ bán dẫn ba chiều (3D) và hai chiều (2D).

Gần đây đã có một số công trình nghiên cứu BGR cho các QWW bán dẫn [4-8]. Benner và Haug [4] đã nghiên cứu BGR trong PPA với giới hạn gần đúng giả tĩnh, không tính đến tương tác hạt tải-phonon, thường được gọi là gần đúng giả tĩnh  $\epsilon_0$ . Hu và DasSarma [5] đã nghiên cứu BGR của QWW dưới ảnh hưởng của plasmon trong RPA, nhưng lại bỏ qua sự chắn của lỗ trống. Nguyễn Trung Dân và Bechstedt [6] đã tính BGR của QWW trong PPA với giới hạn gần đúng giả tĩnh, có tính đến tương tác hạt tải-phonon LO và đã tìm thấy ảnh hưởng của phonon làm thu nhỏ giá trị tuyệt đối của BGR. Güven và Tanatar [7] đã tính BGR của QWW trong RPA với giới hạn gần đúng giả tĩnh. D.B. Tran Thoai và H.T. Cao [8] đã nghiên cứu BGR trong gần đúng động học với giới hạn PPA. Cả hai bài báo [7,8] đều tìm thấy ảnh hưởng của phonon làm tăng giá trị tuyệt đối của BGR.

Chúng tôi nhận thấy, cùng sự nghiên cứu ảnh hưởng của phonon lên BGR, với cách tiếp cận gần như nhau, đều xét phạm vi gần đúng giả tĩnh của các công trình [6] và [7], nhưng lại tìm thấy kết quả trái ngược nhau, chỉ có kết quả của [7] mới phù hợp với cách tiếp cận động học của [8]. Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu độ tái chuẩn hóa khe dải cho hệ QWW trong phạm vi gần đúng PPA với giới hạn gần đúng giả tĩnh, nhằm trả lời câu hỏi ảnh hưởng của phonon lên BGR trong gần đúng giả tĩnh có phù hợp với trong gần đúng động học không

và vì sao kết quả của công trình [6] lại khác biệt với [7] và [8].

## 2. Lý thuyết

Chúng tôi sử dụng mô hình QWW xuất phát từ một giếng lượng tử (QW) 2D, trong đó các điện tử và lỗ trống được giam nhốt trong thế bên parabol theo hướng x với tổng của bề rộng dải con toàn phần  $\Omega$ . Chúng tôi chỉ xét trường hợp hạt tải định xứ trong dải con thấp nhất. Theo hướng trục dây QWW có chiều dài L (trục z) hạt tải sẽ chuyển động tự do.

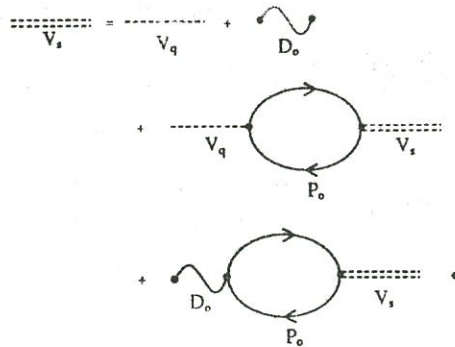
Giải phương trình Schrödinger cho dao động tử điều hòa, ta có được hàm sóng của hạt tải và biến đổi Fourier theo hướng z của thế tương tác Coulomb giữa các hạt tải:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikz} \left[ \frac{\mu\Omega}{\pi\hbar} \right]^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\mu\Omega}{2\hbar} x^2} \sqrt{\delta(y)}, \quad (1)$$

$$V(q) = \frac{e^2}{\epsilon_\infty L} e^{\frac{q^2}{4\mu\Omega}} K_0\left(\frac{q^2}{4\mu\Omega}\right) \quad (\hbar = 1), \quad (2)$$

trong đó  $\mu$  là khối lượng thu gọn của cặp điện tử-lỗ trống,  $K_0$  là hàm Bessel biến dạng bậc 0 và  $\epsilon_\infty$  là hằng số điện môi ở tần số cao.

Thế chẵn  $V_s(q, \omega)$  trong hệ bán dẫn có cực được xác định bởi tương tác hạt tải-hạt tải và hạt tải-phonon LO. Trong phạm vi gần đúng RPA, thế chẵn được xác định từ phương trình Dyson [1-3]:



Hình 1: Là giản đồ của thế tương tác bị chắn bởi hạt tải-phonon.

$D_0(q, \omega)$  là hàm truyền phonon:

$$D_0(q, \omega) = V(q) \left( 1 - \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0} \right) \frac{\omega_L^2}{\omega^2 - \omega_L^2},$$

$P_0(k, q, \omega)$  là hàm phân cực được xác định từ công thức Lindhard:

$$P_0(k, q, \omega) = \sum_{k, i=e, h} \frac{f^i(k-q) - f^i(k)}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon^i(k-q) - \epsilon^i(k))},$$



trong đó  $\epsilon_0$  là hằng số điện môi ở tần số thấp,  $\omega_L$  là tần số phonon LO khối của chất bán dẫn đang xét,  $\hbar\epsilon^i(k)$  và  $f^i(k)$  tương ứng là năng lượng tự do và hàm phân bố Fermi-Dirac của điện tử, lỗ trống. Từ giản đồ của phương trình Dyson (hình 1), ta nhận được trực tiếp một phương trình đại số :

$$V_s(q, \omega) = \frac{V(q) + D_0(q, \omega)}{1 - [V(q) + D_0(q, \omega)]P_0(q, \omega)} \quad (3)$$

Thay thế  $D_0$  và  $P_0$  vào (3) ta thu được kết quả :

$$V_s(q, \omega) = \frac{\epsilon_\infty V(q)}{\epsilon_\infty + \Pi_L(\omega) + \Pi_{ei}^0(q, \omega)} = \frac{\epsilon_\infty V(q)}{\epsilon(q, \omega)} \quad (4)$$

trong đó  $\Pi_L(\omega)$  là hàm phân cực mạng cho bởi :

$$\Pi_L(\omega) = \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_T^2}} ; \quad (\omega_T^2 = \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0} \omega_L^2)$$

$\Pi_{ei}^0(q, \omega)$  là hàm phân cực điện, được xác định từ công thức Lindhard :

$$\Pi_{ei}^0(q, \omega) = -\epsilon_\infty V(q) \sum_{k, i=e, h} \frac{f^i(k-q) - f^i(k)}{\hbar(\omega + i\delta + \epsilon^i(k-q) - \epsilon^i(k))} \quad (5)$$

và có thể làm đơn giản bởi gần đúng cực plasmon đơn (SPPA). Lúc đó ta thu được :

$$\Pi_{ei}^0(q, \omega) = -\epsilon_\infty V(q) P_0(q, \omega) = -\epsilon_\infty \frac{\omega_{pl}^2}{(\omega + i\delta)^2 + \omega_{pl}^2 - \omega_q^2} \quad (6)$$

với  $\omega_{pl}$  tần số plasma một chiều, xác định từ công thức Lindhard trong giới hạn bước sóng dài và  $\omega_q$  cho bởi :

$$\omega_{pl}^2 = \frac{nL}{\mu} q^2 V(q) ; \quad \omega_q^2 = \omega_{pl}^2 + \frac{nq^2}{\mu\chi} + \frac{q^4}{4\mu^2} \quad ,$$

$\chi$  là tham số chắn :

$$\chi = \sum_{i=e, h} \frac{\partial n}{\partial \mu^i} = \frac{2\beta}{L} \sum_{k, i=e, h} f^i(k)(1 - f^i(k))$$

Biểu thức thế chắn (4) có thể viết :

$$V_s(q, \omega) = V(q) \left\{ 1 + \frac{A_{12}}{(\omega + i\delta)^2 - \omega_1^2} + \frac{A_{21}}{(\omega + i\delta)^2 - \omega_2^2} \right\} \quad (7)$$

trong đó  $\omega_i$  và  $A_{ij}$  được xác định:

$$\omega_{i=1,2}^2 = \frac{\omega_L^2 + \omega_q^2}{2} - (-1)^i \sqrt{\left(\frac{\omega_L^2 - \omega_q^2}{2}\right)^2 + \omega_{pl}^2(\omega_L^2 - \omega_T^2)} \quad (8)$$

$$A_{ij(i,j=1,2;i \neq j)} = \frac{\omega_i^2(\omega_{pl}^2 + \omega_L^2 - \omega_T^2) - (\omega_L^2\omega_q^2 - \omega_L^2\omega_{pl}^2 + 2\omega_T^2\omega_{pl}^2 - \omega_T^2\omega_q^2)}{\omega_i^2 - \omega_j^2} \quad (9)$$

Chúng ta tính năng lượng riêng của hạt tải trong gần đúng thế chắn (shielded potential approximation):

$$\Sigma^i(k, z) = -\frac{1}{\beta} \sum_{q, z'} V_s(q, z') G_0^i(k - q, z - z'), \quad (10)$$

với :

$$G_0^i(k, z) = \frac{1}{z - \hbar\varepsilon^i(k) + \mu^i} \quad (11)$$

$\mu^i$  là thế hóa của điện tử, lỗ trống.

Trong gần đúng giả tĩnh ta bỏ qua năng lượng giật lùi ( $\hbar\varepsilon^i(k) - \hbar\varepsilon^i(k - q) = 0$ ) ta thu được :

$$\Sigma^i(k, \varepsilon^i(k)) = \Sigma_{ex} + \Sigma_c \quad (i = e, h) \quad , \quad (12)$$

với :

$$\Sigma_{ex} = - \sum_{q, j l (j \neq l)} V(q) \left( 1 - \frac{A_{jl}}{\omega_j^2} \right) f^i(k - q), \quad (13)$$

$$\Sigma_c = \frac{1}{2} \sum_{q, j l (j \neq l)} \left\{ V(q) \left( 1 - \frac{A_{jl}}{\omega_j^2} \right) - V(q) \right\} \quad (14)$$

Năng lượng riêng trong gần đúng giả tĩnh còn có thể viết :

$$\Sigma^i(k, \varepsilon^i(k)) = - \sum_q V_s(q, 0) f^i(k - q) + \frac{1}{2} \sum_q (V_s(q, 0) - V(q)) \quad (15)$$

Độ tái chuẩn hóa khe dải theo định nghĩa :

$$\Delta E_g = \Sigma^e(k = 0, \varepsilon^e(0)) + \Sigma^h(k = 0, \varepsilon^h(0)) \quad .$$

Lúc đó cả hai trường hợp gần đúng giả tĩnh có tính đến tương tác hạt tải-phonon và gần đúng giả tĩnh  $\varepsilon_0$  đều cho ta biểu thức :

$$\Delta E_g = - \sum_{q, i=e, h} V_s(q, 0) f^i(q) + \sum_q [V_s(q, 0) - V(q)] \quad (16)$$

Thế chắn  $V_s(q, 0)$  trong gần đúng giả tĩnh có tính đến tương tác hạt tải-phonon cho bởi biểu thức (7) và  $V(q)$  cho bởi (2), còn thế chắn  $V_s(q, 0)$  trong gần đúng giả tĩnh  $\varepsilon_0$  cho bởi :

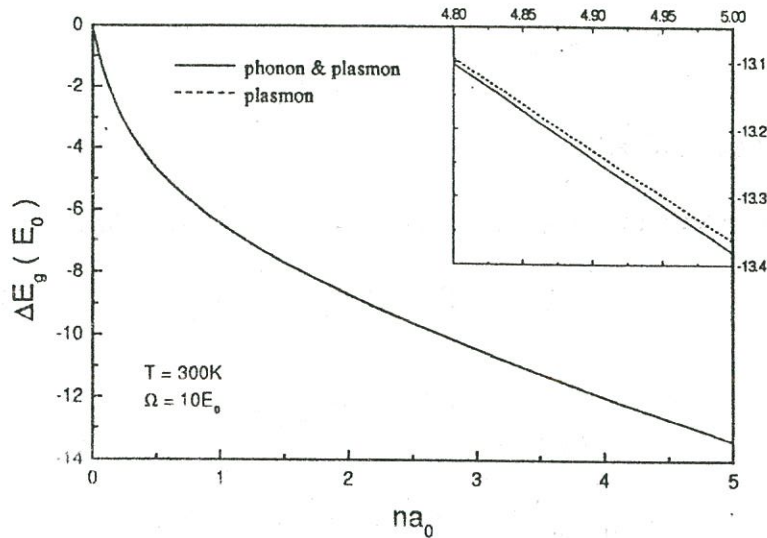
$$V_s(q, \omega) = V(q) \left( 1 + \frac{\omega_{pl}^2}{(\omega + i\delta)^2 - \omega_q^2} \right),$$

trong đó  $V(q)$  được xác định từ (2) nhưng thay  $\varepsilon_\infty$  bởi  $\varepsilon_0$  .



### 3. Kết quả tính số và thảo luận các kết quả

Trong phần này chúng tôi tính toán bằng số BGR cho trường hợp QWW GaAs trong các gần đúng giả tĩnh  $\epsilon_0$  và gần đúng giả tĩnh có tính đến tương tác hạt tải-phonon, với các tham số được sử dụng là :  $m_e = 0.067m_0$ ;  $m_h = 0.45m_0$  ( $m_0$  là khối lượng của điện tử tự do);  $\mu = 0.058m_0$ ;  $\epsilon_0 = 13.1$ ;  $\epsilon_\infty = 11.1$ ;  $a_0 = 120 \text{ \AA}$  ( $a_0$  bán kính Bohr hiệu dụng ba chiều);  $E_0 = 4.6meV$  ( $E_0$  là năng lượng exciton Rydberg ba chiều);  $\omega_L = 36meV$ . Trong



Hình 2: Độ tái chuẩn hóa khe dải theo nồng độ hạt tải

hình 2 là độ tái chuẩn hóa khe dải (BGR) theo nồng độ hạt tải, tại nhiệt độ  $T = 300K$  và  $\Omega = 10E_0$ . Đường liền nét tương ứng với năng lượng riêng của hạt tải dưới ảnh hưởng của liên kết plasmon-phonon trong trường hợp gần đúng giả tĩnh có tính đến tương tác hạt tải-phonon, đường chấm tương ứng với năng lượng riêng cho hạt tải dưới ảnh hưởng của plasmon trong gần đúng giả tĩnh  $\epsilon_0$  mà Benner và Haug đã nghiên cứu [4].

Cả hai gần đúng đều cho kết quả gần như đồng nhất với nhau. Hình vẽ khuếch đại trong góc của hình 2 cho thấy ảnh hưởng của phonon trong gần đúng giả tĩnh làm tăng giá trị tuyệt đối của độ tái chuẩn hóa khe dải (BGR) và độ gia tăng này, tăng lên một ít (so với gần đúng giả tĩnh  $\epsilon_0$ ) khi mật độ tăng lên. Kết quả của chúng tôi thu được khá phù hợp với các kết quả tính toán gần đúng động học của các tác giả D.B.Tran Thoai, H.T.Cao trong các công trình [8] và kết quả tính toán trong gần đúng RPA với giới hạn gần đúng giả tĩnh của các tác giả Güven và Tanatar trong công trình [7]. Trong khi đó kết quả tính toán của các tác giả Nguyen Trung Dan và Bechstedt trong công trình [6] thì cho trái ngược lại, nghĩa là ảnh hưởng của phonon LO khối làm giảm khá nhiều giá trị tuyệt đối của độ tái chuẩn hóa khe dải (BGR) so với trường hợp chỉ có ảnh hưởng của plasmon. Sở dĩ có các kết quả trái ngược trên, theo sự nhận định của chúng tôi là do có sự nhầm lẫn trên hình thức luận của biểu thức thế chắn và kết quả của biểu thức hàm điện môi mà các tác giả trong công trình [6] đã sử dụng. Trước hết trong biểu thức (2) của thế Coulomb trần công trình [6] đã đưa vào  $\epsilon_0$

thay vì  $\epsilon_\infty$  :

$$V(q) = \frac{e^2}{\epsilon_0} \exp\left[\frac{q^2}{4\mu\Omega}\right] K_0\left(\frac{q^2}{4\mu\Omega}\right).$$

Mặt khác thế chắn trong công trình [6] có dạng :

$$W_s(q, \omega) = \frac{V(q) + V_{ph}(q, \omega)}{\epsilon(q, \omega)}, \quad (17)$$

với :

$$V_{ph}(q, \omega) = (2\pi\alpha) \left(\frac{2\omega_{LO}^3}{m_j}\right)^{1/2} \frac{2\omega_{LO}}{(\omega^2 + \omega_{LO}^2)} V(q); \quad (j = e, h), \quad (18)$$

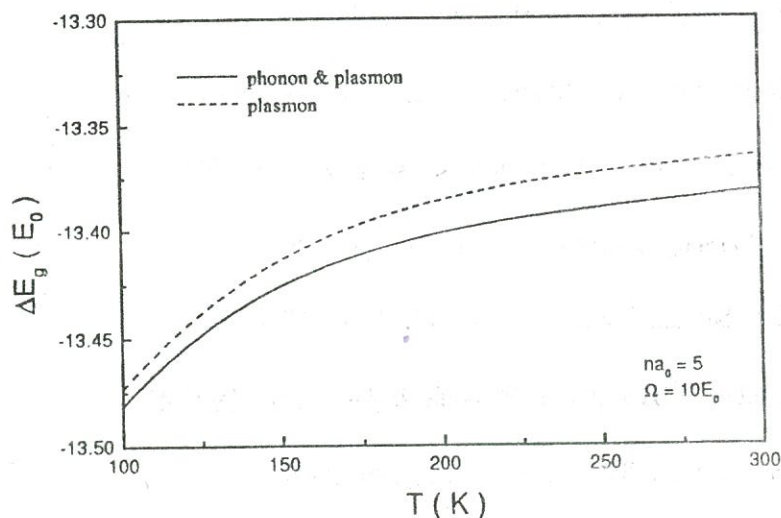
trong đó  $\alpha$  là hằng số kết cặp Fröhlich [1,2,9],  $\omega_{LO}$  là tần số của phonon LO.

Biểu thức (17) khác biệt quá nhiều với biểu thức chuẩn (4) trong các công trình [1-3]. Vì sự nhầm lẫn này nên công trình [6] dẫn đến kết quả tính số trái ngược như chúng tôi đã nêu trên.

Vài kết quả tính toán cho hiệu số độ tái chuẩn hóa trong gần đúng giả tĩnh ( $\Delta E_g$ ) và gần đúng giả tĩnh  $\epsilon_0$  ( $\Delta E_g^{\epsilon_0}$ ) :

$$\Delta E_g - \Delta E_g^{\epsilon_0} = 8.10^{-3} E_0 \simeq 0.037 meV \text{ tại } na_0 = 4.80,$$

$$= 18.10^{-3} E_0 \simeq 0.083 meV \text{ tại } na_0 = 5.00.$$



Hình 3: Độ tái chuẩn hóa khe dải theo nhiệt độ

Trong hình 3, chúng tôi biểu diễn độ tái chuẩn hóa khe dải trong hai gần đúng giả tĩnh  $\epsilon_0$  (chỉ có plasmon) và gần đúng giả tĩnh có tính đến tương tác hạt tải-phonon theo nhiệt độ. Ta thấy ảnh hưởng của phonon làm tăng giá trị tuyệt đối của độ tái chuẩn hóa.



### 3 . Kết luận :

Kết quả tính toán trong gần đúng giả tĩnh có tính đến tương tác hạt tải-phonon của chúng tôi trong phạm vi PPA phù hợp với kết quả của công trình [8] và phù hợp với kết quả giả tĩnh trong phạm vi RPA của công trình [7] . Chỉ có công trình [6] là cho kết quả trái ngược với các công trình còn lại .

Độ co của khe dải dưới ảnh hưởng của plasmon hay plasmon liên kết phonon đã giải thích được bản chất dịch chuyển về vùng đỏ của phổ quang học cho hệ bán dẫn.

## THE BAND - GAP RENORMALIZATION OF PHOTOEXCITED QUANTUM - WELL WIRES

Dao Van Cu

**ABSTRACT :** *We study the band-gap renormalization (BGR) of photoexcited quantum-well wires (QWWs) including the Coulomb interaction and carrier-LO phonon interaction. Numerical results for GaAs QWW within the quasi static show that the influence of the carrier-phonon interaction on the BGR is rather small .*

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] H.Haug and S.W.Koch, Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors, World Scientific, Singapore, 1993.
- [2] G.D.Mahan, Many-particles physics, Plenum Press, New York, 1981.
- [3] S. Schmitt-Rink, D.B. Tran Thoai, and H. Haug, Z.Physik B39, 1980, 25 .
- [4] S. Benner and H. Haug, Europhys. Lett. 16 , 1991, 579 .
- [5] B. Hu and S.Das Sarma, Phys. Rev. Lett 68. 1992, 1750 .
- [6] Nguyen Trung Dan, F. Bechstedt, Physica. B 219 - 220, 1996,47.
- [7] K.Güven and B. Tanatar, Phys. Rev. B. 57, 1998, 3994 .
- [8] D.B. Tran Thoai and H.T.Cao, Solid States Commun. 109, 1999, 413.
- [9] S.Das Sarma and B.A.Mason, Phys. 163, 1985, 78 .