

# **NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT EXCITON TRONG GIẾNG LƯỢNG TỬ BÁN DẪN VỚI ĐÓNG GÓP CỦA HIỆU ỨNG POLARON VÀ ĐIỆN TRƯỜNG NGOÀI**

**Nguyễn Như Huy**

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên

(*Bài nhận ngày 13/11/2000*)

(*hoàn chỉnh sửa chữa ngày 07/12/2000*)

**TÓM TẮT :** Năng lượng liên kết exciton Wannier trong giếng lượng tử GaAs / GaAlAs đã được chúng tôi khảo sát tính toán bằng phép gần đúng biến thiên. Kết quả cho thấy khi có mặt điện trường. Độ giảm năng lượng liên kết exciton theo sự tăng kích thước giếng trong trường hợp kể đến hiệu ứng polaron trở nên nhỏ hơn khi so sánh với trường hợp không có hiệu ứng polaron.

## **1) ĐẶT VẤN ĐỀ**

Trong khoảng thời gian hai mươi năm gần đây có sự tiến bộ rất đáng kể về kỹ thuật cấy tinh thể mà kích thước của chúng rất bé, vào cỡ dưới  $\mu\text{m}$ . Một trong các cấu trúc đó là các giếng lượng tử bán dẫn (*Semiconductor Quantum Wells*). Trong các cấu trúc rất mỏng như vậy, các điện tử di chuyển tự do trong mặt phẳng thẳng góc với phương của giếng, và sự chuyển động theo phương của giếng bị lượng tử hóa một chiều. Và do vậy, các tính chất điện – quang của giếng lượng tử cũng rất khác tính chất điện quang của bán dẫn khối tương ứng.

Một trong những đặc điểm của các cấu trúc bán dẫn này là các phổ phát xạ và hấp thụ chủ yếu phụ thuộc vào trạng thái liên kết của điện tử và lỗ trống, nói cách khác, phụ thuộc vào năng lượng liên kết của exciton [1-5], do vậy việc hiểu biết về năng lượng liên kết của chúng đóng một vai trò quan trọng trong các công trình nghiên cứu về các cấu trúc đặc biệt này.

Bằng sự khảo sát phổ kích thích phát quang, Miller *et al.* [1] đã xác định được năng lượng liên kết của exciton như hàm của kích thước giếng lượng tử GaAs. Sau đó Roger *et al.* [2] đã thông báo chi tiết nghiên cứu thực nghiệm của mình về giếng lượng tử bán dẫn GaAs, kết quả cho thấy các phép đo năng lượng liên kết thu được trong từ trường yếu phù hợp tương đối tốt với công trình của Miller *et al.* Brum và Bastard [3] bằng việc đưa thêm điện trường vào đã chứng tỏ được rằng năng lượng liên kết của exciton giảm theo sự tăng kích thước giếng, đặc biệt giảm rất mạnh theo sự tăng của cường độ điện trường. Degani và Hipo'lito [4] đã khảo sát ảnh hưởng của hiệu ứng polaron trên năng lượng liên kết exciton trong giếng lượng tử bán dẫn, kết quả cho thấy hiệu ứng polaron đã làm tăng năng lượng liên kết của exciton.

Mở rộng bài toán này, Tran Thoai [5] đã lưu ý đến hiệu ứng ảnh điện trong tính toán

năng lượng liên kết cung tỏ được rằng đáng điệu biến thiên theo bề dày của giếng có cùng dạng với công trình của Degani và Hipo'lito nhưng đã được khuếch đại lên.

Tuy nhiên, trong các công trình trên đây, các tác giả khi xét về bài toán năng lượng liên kết exciton chỉ khảo sát riêng rẽ ảnh hưởng của điện ngoài hoặc đóng góp của hiệu ứng polaron trên năng lượng liên kết exciton. Trong thực tế, việc sử dụng điện trường để điều khiển hoạt động của các thiết bị có cấu trúc lớp rất mỏng như giếng lượng tử là rất phổ biến, mặt khác sự có mặt của phonon và ảnh hưởng của quá trình tán xạ với phonon trên năng lượng liên kết exciton là không thể bỏ qua. Do vậy nhằm mục đích mở rộng các bài báo trước đây, trong công trình này chúng tôi sẽ thông báo một vài kết quả về năng lượng liên kết của exciton trong giếng lượng tử bán dẫn  $GaAs - GaAlAs$  có kể đến đồng thời sự tán xạ với các phonon quang học và sự có mặt của điện trường ngoài.

## II) CÁC TÍNH TOÁN LÝ THUYẾT

Chúng ta xét một lớp bán dẫn  $GaAs$  có bề dày  $d$  được kẹp giữa hai lớp bán dẫn  $GaAlAs$ . Lúc đó điện tử bị giam nhốt trong một giếng thế giả một chiều hình thành trong vùng  $GaAs$  của siêu mạng và di chuyển tự do trong mặt phẳng  $(x,y)$ , trong khi chuyển động theo trục  $z$  bị lượng tử hoá. Một điện tử trong miền hoá trị nhận được năng lượng kích thích chuyển lên miền dẫn để lại trong miền hoá trị một lỗ trống, liên kết giữa điện tử trong miền dẫn và lỗ trống trong miền hoá trị của tinh thể bán dẫn tạo thành một trạng thái liên kết gọi là exciton, điện trường  $F$  đặt dọc theo trục  $z$ . Gốc tọa độ chọn ở tâm giếng. Trong công trình này chúng tôi giới hạn ở trường hợp độ cao rào thế là vô hạn. Trong gần đúng khối lượng hiệu dụng, Hamiltonian mô tả tương tác của hệ được cho bởi

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + \Delta_{\vec{\rho}_e} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_h} \left( \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + \Delta_{\vec{\rho}_h} \right) + eF(z_e - z_h) - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + 1 \sum_q \hbar \omega \hat{a}_q^+ \hat{a}_q + \sum_q \{ V_q [ e^{i\vec{q}\vec{r}_e} - e^{i\vec{q}\vec{r}_h} ] \hat{a}_q + hc \} \quad (1)$$

trong đó

$$V_q = \frac{-i}{q} \left[ \frac{2\pi e^2 \hbar \omega}{V} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2}, \quad (2)$$

$m_e$  và  $m_h$  lần lượt là khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống,  $\vec{r}_e = (\vec{\rho}_e, \bar{z}_e)$  là tọa độ của điện tử,  $\vec{r}_h = (\vec{\rho}_h, \bar{z}_h)$  là tọa độ của lỗ trống,  $\hat{a}_q^+$  là toán tử sinh phonon quang học ứng với vectơ sóng phonon  $\vec{q}$  và tần số  $\omega$ .  $\epsilon_\infty$  và  $\epsilon_0$  lần lượt là các hằng số điện môi quang học và hằng số điện môi tĩnh.

Trước tiên, ta sử dụng tọa độ khối tâm, và khối lượng rút gọn:

$$\vec{R} \equiv (\vec{R}_1, \vec{Z}) = \alpha \vec{r}_e + \beta \vec{r}_h, \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}.$$

Trong đó

$$\alpha = \frac{m_h}{M}, \beta = \frac{m_e}{M}, \quad M = m_e + m_h$$

và

$$\vec{r} \equiv (\vec{\rho}, \vec{z}) = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad (3)$$

Khi đó Hamiltonian  $\hat{H}$  trở thành

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}_1} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{\rho}} \\ & + eF(z_e - z_h) - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |\vec{r}|} + \sum_q \{ V_q e^{i\vec{q}\vec{r}} (e^{i\vec{\rho}\vec{q}} - e^{-i\alpha\vec{q}\vec{r}}) \hat{a}_q + hc \} \quad (4) \end{aligned}$$

Ta không thể tìm được lời giải chính xác của phương trình Schrodinger với Hamiltonian (4). Vì vậy, để tính năng lượng liên kết của exciton ở trạng thái cơ bản chúng tôi sử dụng phương pháp biến thiên để thu được lời giải gần đúng. Trên cơ sở phương pháp đã được giới thiệu bởi Lee, Low, và Pines [7] chúng tôi sử dụng hai phép biến đổi unita như sau:

$$\hat{H}_1 = \hat{U}_1^{-1} \hat{H} \hat{U}_1 \quad (5)$$

và

$$\hat{H}_2 = \hat{U}_2^{-1} \hat{H}_1 \hat{U}_2 \quad (6)$$

trong đó

$$\hat{U}_1 = \exp \left( -i \sum_q \vec{Q} \vec{R}_1 \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q \right) \quad (7)$$

$$\hat{U}_2 = \exp \left( \sum_q [f_q \hat{a}_q^\dagger - f_q^* \hat{a}_q] \right) \quad (8)$$

Phép biến đổi unita  $\hat{U}_1$  dùng để khử tọa độ  $\vec{R}_1$  trong biểu thức của Hamiltonian  $\hat{H}$  và  $\vec{Q}$  là thành phần của vectơ sóng phonon trong mặt phẳng ngang ( $\vec{q} = \vec{q}_z + \vec{Q}$ ).

Trong phép biến đổi unita  $\hat{U}_2$  các đại lượng  $f_q$  và  $f_q^*$  được xác định từ điều kiện cực tiểu hoá trị trung bình của  $\hat{H}_2$ .

Để tính năng lượng exciton ở trạng thái cơ bản chúng tôi chọn hàm sóng thử có dạng như sau:

$$\Psi = N \cos\left(\frac{\pi}{d} z_e\right) \exp(-\beta_e z_e) \cos\left(\frac{\pi}{d} z_h\right) \exp(-\beta_h z_h) \exp(-\delta \rho), \quad (9)$$

trong đó  $N$  là hằng số chuẩn hoá,  $\beta_e$  và  $\beta_h$  lần lượt là các tham số biến thiên đặc trưng cho ảnh hưởng của điện trường trên điện tử và lỗ trống,  $d$  là bề dày của giếng,  $\delta$  là tham số tương tác Coulomb giữa điện tử và lỗ trống. Từ đó, năng lượng exciton ở trạng thái cơ bản được xác định bằng cách cực tiểu hoá trị trung bình của  $\hat{H}_2$ :

$$E_{exc} = (\langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle)_{\min} = (E_0 + E_1 + E_2 + E_3)_{\min} \quad (10)$$

Vì việc dẫn xuất biểu thức giải tích  $\langle \Psi | \hat{H}_2 | \Psi \rangle$  là khá dài nên ở đây chúng tôi chỉ trình bày kết quả cuối cùng:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \delta^2 + \frac{\pi^2}{d^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{\beta_e^2}{m_e} + \frac{\beta_h^2}{m_h} \right), \quad (11)$$

$$E_1 = - \frac{4\pi\delta e^2 N^2}{\epsilon_\infty} \int_0^\infty \frac{S(Q)dQ}{(4\delta^2 + Q^2)^{3/2}}, \quad (12)$$

$$N^2 = \frac{32\delta^2 \beta_e \beta_h (\pi^2 + \beta_e^2 d^2)(\pi^2 + \beta_h^2 d^2)}{\pi^5 (e^{\beta_e d} - e^{-\beta_e d})(e^{\beta_h d} - e^{-\beta_h d})} \quad (13)$$

$$S(Q) = \int_{-d/2}^{d/2} \cos\left(\frac{\pi z_e}{d}\right) \exp(-2\beta_e z_e) dz_e \int_{-d/2}^{d/2} \cos\left(\frac{\pi z_h}{d}\right) \exp(-2\beta_h z_h) \exp(-Q|z_e - z_h|) dz_h \quad (14)$$

$$E_2 = eF \langle \Psi | z_e - z_h | \Psi \rangle = eF(X_1 - X_2) \quad (15)$$

$$X_1 = \frac{(1 - e^{2\beta_e d})(\pi^2 + 3\beta_e^2 d^2) + \beta_e d(1 + e^{2\beta_e d})(\pi^2 + \beta_e^2 d^2)}{2\beta_e(\pi^2 + \beta_e^2 d^2)(1 - e^{2\beta_e d})},$$

$$X_2 = \frac{(1 - e^{2\beta_h d})(\pi^2 + 3\beta_h^2 d^2) + \beta_h d(1 + e^{2\beta_h d})(\pi^2 + \beta_h^2 d^2)}{2\beta_h(\pi^2 + \beta_h^2 d^2)(1 - e^{2\beta_h d})},$$

$$E_3 = -8\pi^2 e^2 \delta^2 N^4 \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \int_0^\infty \frac{dQ}{\left(1 + \frac{\hbar Q^2}{2M\omega}\right)} \Gamma, \quad (16)$$

với:

$$\Gamma = \left[ \frac{I_2^2 S_e(Q)}{(4\delta^2 + \beta^2 Q^2)^3} + \frac{I_1^2 S_h(Q)}{(4\delta^2 + \alpha^2 Q^2)^3} - \frac{2I_1 I_2 S(Q)}{(4\delta^2 + \beta^2 Q^2)^{3/2} (4\delta^2 + \alpha^2 Q^2)^{3/2}} \right], \quad (17)$$

trong đó  $S(Q)$  đã được xác định bởi (14) và  $S_e(Q)$ ,  $S_h(Q)$  lần lượt được xác định bởi:

$$S_e(Q) = S(Q)|_{\beta_h = \beta_e}, \quad (18)$$

$$S_h(Q) = S(Q)|_{\beta_e = \beta_h}, \quad (19)$$

$$I_1 = \frac{\pi^2 (e^{\beta_e d} - e^{-\beta_e d})}{4\beta_e (\pi^2 + \beta_e^2 d^2)}, \quad (20)$$

$$I_2 = \frac{\pi^2 (e^{\beta_h d} - e^{-\beta_h d})}{4\beta_h (\pi^2 + \beta_h^2 d^2)}, \quad (21)$$

Năng lượng liên kết exciton được xác định bởi

$$E_b = E_e + E_h - E_{exc} \quad (22)$$

trong đó các mức năng lượng của điện tử ( $E_e$ ) và lỗ trống ( $E_h$ ) được xác định như sau:

Ta xét trường hợp chỉ có điện tử chuyển động trong giếng lượng tử GaAs.

Hamiltonian mô tả tương tác của hệ điện tử – phonon với sự có mặt của điện trường ngoài  $F$  không đổi được cho bởi:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + \Delta_{\vec{r}_e} \right) + eFz_e + \sum_q \hbar\omega \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + \sum_q \{ V_q [ e^{i\vec{q}\vec{r}_e} ] \hat{a}_q + hc \} \quad (23)$$

$$V_q = \frac{-i}{q} \left[ \frac{2\pi e^2 \hbar\omega}{V} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2}, \quad (24)$$

Hàm sóng thử được chọn như sau:

$$\Phi_e = N_e \cos\left(\frac{\pi z_e}{d}\right) \exp(-\beta_e z_e), \quad (25)$$

Sử dụng các phép biến đổi và các bước tiến hành hoàn toàn tương tự như trường hợp exciton ta thu được biểu thức mức năng lượng của điện tử trong giếng lượng tử biến thiên phụ thuộc vào tham số  $\beta_e$ . Khảo sát tương tự ta thu được biểu thức mức năng lượng của lỗ trống biến thiên phụ thuộc tham số  $\beta_h$ . Năng lượng của điện tử ( hoặc lỗ trống ) ứng với mỗi giá trị xác định của kích thước giếng  $d$  thu được bằng cách cực tiểu hoá biến thiên biểu thức mức năng lượng điện tử ( hoặc lỗ trống ) theo  $\beta_e$  ( hoặc  $\beta_h$  ).

Năng lượng exciton ứng với mỗi giá trị xác định của kích thước giếng  $d$  về nguyên tắc thu được bằng cách cực tiểu hoá biến thiên theo 3 tham số  $\beta_e$ ,  $\beta_h$ , và  $\delta$ . Tuy nhiên, sự thay đổi các giá trị  $\beta_e$ ,  $\beta_h$  ứng với giá trị cực tiểu của năng lượng trong trường hợp exciton so với trường hợp điện tử, hoặc lỗ trống riêng biệt là không đáng kể và để đơn giản trong quá trình tính toán năng lượng exciton liên kết yếu, ta có thể biến thiên năng lượng exciton theo tham số  $\delta$  còn các tham số  $\beta_e$ ,  $\beta_h$  được lấy từ các giá trị tương ứng thu được khi cực tiểu hoá các trường hợp điện tử hoặc lỗ trống riêng rẽ.

### III) CÁC KẾT QUẢ BẰNG SỐ

Trong phần này chúng tôi sẽ trình bày các kết quả tính toán bằng số cho giếng lượng tử  $GaAs / GaAlAs$  đã được nghiên cứu rộng rãi với các tham số  $m_e = 0.067m_0$ ,  $m_h = 0.46m_0$ ,  $\epsilon_0 = 13.1$ ,  $\epsilon_\infty = 11.1$ , trong đó  $m_0$  là khối lượng điện tử tự do, năng lượng chuẩn hạt phonon  $\hbar\omega = 35.2meV$ .

Hình 1 vẽ năng lượng exciton theo bề dày giếng lượng tử trong 4 trường hợp: có tính và không tính đến hiệu ứng polaron cùng với sự có mặt và không có mặt điện trường ngoài. Kết quả cho thấy năng lượng liên kết giảm theo sự tăng bề dày lớp bán dẫn. So sánh hai đường trên đồ thị trong trường hợp không kể đến tán xạ với phonon: đường liền vẽ năng lượng liên kết exciton khi không có mặt điện trường ngoài, đường gạch ngắn vẽ năng lượng liên kết exciton khi có mặt điện trường ngoài không đổi cường độ  $F = 100kV/cm$ , hình vẽ cho thấy sự có mặt của điện trường đã làm giảm năng lượng liên kết exciton, ta tìm lại được kết quả công trình của Bastard [3] và được giải thích là dưới tác dụng của điện trường, điện tử và lỗ trống bị dịch chuyển ngược chiều do đó khoảng cách giữa chúng tăng lên, và kết quả là làm giảm năng lượng liên kết. Ngoài ra hình vẽ còn cho thấy với các giếng lượng tử có kích thước càng lớn ( $d > 100 \text{ \AA}$ ), ảnh hưởng của điện trường trên năng lượng liên kết càng mạnh.

Khi không có mặt điện trường, so sánh đường liền ứng với trường hợp không kể sự tán xạ với phonon với đường chấm mô tả năng lượng liên kết exciton có kể sự tán xạ với phonon, ta thấy chúng đều có dạng giảm theo sự tăng của kích thước giếng và hiệu ứng polaron đã làm tăng năng lượng liên kết một cách đáng kể, ở đây ta tìm lại được các kết quả của Degani và Hipo'lito [4], Tran Thoai [5] và được giải thích là: khi kích thước giếng lượng tử càng hẹp sự giam nhốt càng chặt chẽ, do đó năng lượng liên kết càng lớn. Hơn nữa khi va chạm với phonon năng lượng đóng góp do va chạm đã đẩy điện tử và lỗ trống lại gần nhau làm tăng cường tương tác hút Coulomb, vì thế hiệu ứng polaron đã làm tăng

năng lượng liên kết exciton. Đường chấm gạch mô tả năng lượng liên kết exciton khi có mặt điện trường ngoài không đổi  $F = 100kV/cm$  và có tính đến hiệu ứng polaron, đường biểu diễn cũng cho thấy điện trường có tác dụng làm giảm năng lượng liên kết exciton.

Như vậy, kết quả khảo sát bài toán exciton bằng phương pháp biến thiên với Hmiltonian (1) và hàm sóng thử (9) cho thấy: điện trường có tác dụng làm giảm trong khi hiệu ứng polaron có tác dụng làm tăng năng lượng liên kết. Tuy nhiên, sự có mặt của hiệu ứng polaron đã làm cho độ giảm năng lượng liên kết exciton theo sự tăng kích thước giếng lượng tử trở nên nhỏ hơn khi so sánh với trường hợp không kể đến hiệu ứng polaron. Điều này được giải thích một cách định tính là hiệu ứng polaron đã làm tăng khối lượng hiệu dụng của điện tử và lỗ trống, do vậy exciton trở nên nặng hơn, vì thế tác dụng của điện trường trở nên yếu đi. Trong các trường hợp giới hạn, khi không có hiệu ứng polaron hoặc điện trường, kết quả chúng tôi thu được trở về các kết quả đã được tìm thấy bởi các tác giả khác [3,4,5]. Hơn nữa, với các giếng lượng tử càng mỏng thì hiệu ứng polaron chiếm ưu thế rõ rệt, còn với các giếng lượng tử có kích thước lớn hơn, ảnh hưởng của điện trường bắt đầu chiếm ưu thế trên năng lượng liên kết exciton.

**EXCITON BINDING ENERGY IN SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS  
INCLUDING CONTRIBUTIONS OF THE POLARON EFFECT  
AND THE EXTERNAL ELECTRIC FIELD**

**Nguyen Nhu Huy**

*ABSTRACT : Binding energy of Wannier exciton in GaAs / GaAlAs quantum Well is calculated using a variational approach. Our numerical results show that the decreasing of the exciton binding energy along with increasing of the well's width that takes into account the polaron effect is lower than that without the polaron effect.*

**TÀI LIỆU THAM KHẢO**

- [1] R.C.Miller, D.A.Kleinman, W.T.Tsang, and A.C.Gossard, Phys.Rev.B24 (1981) 1134
- [2] D.C.Rogers, J.Singleton, R.J.Nicholas, C.T.Foxon, and K.Woodbridge, Phys.Rev.B34, 4002 (1986)
- [3] J.A.Brum and Bastard, Phy.Rev B31 ( 1985 ) 3893
- [4] Marcos H. Degani and Oscar Hipo'lito, Phys. Rev. B 35 ( 1987 ) 4507
- [5] D.B.Tran Thoai, Physica B 164 ( 1990 ) 295-297
- [6] Xu Wang and Xi Xia Liang, Solid State Commun 65 ( 1988 ) 83 – 85
- [7] T.D.Lee, F.E.Low and Pines, Phys. Rev. 90 ( 1953 ) 297
- [8] H.Haug and Stephan W. Koch, Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of the Semiconductors, World Scientific, 1990