

# 介电受限对量子点中受限激子的影响

罗 莹 王若桢 马本堃

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

**摘要** 在有效质量近似下, 采用有限深势阱模型研究了强受限范围内, 介电受限对球形、立方形半导体量子点中受限激子的影响. 结果表明在考虑表面极化效应以后, 量子点的形状对受限激子的影响是不可忽略的.

**关键词** 介电受限, 量子点, 受限激子

## 1 引 言

近十几年, 不论在理论上还是在实验上对半导体量子点中激子的量子受限效应进行了广泛的研究<sup>[1~4]</sup>. 人们制备了各种材料和形状的半导体量子点, 利用各种测试手段研究它们的性质. 同时, 各种理论模型也被应用于半导体量子点的研究, 如有效质量近似(EMA)、紧束缚近似、半经验势等方法. 这些理论模型均解释量子点的激子吸收峰随着量子点的尺寸减小蓝移的量子尺寸受限现象.

量子点的量子受限除了量子尺寸受限以外, 还存在介电受限效应. 这种效应是由于量子点的介电常数与其周围介质的介电常数不同引起的. 1979年 Keldysh 首次研究了层状结构的介电受限效应<sup>[5]</sup>. 随后, 人们对量子阱和量子线的介电受限效应进行了研究<sup>[6~7]</sup>. 对量子点的介电常数与其基体的介电常数不同引起的介电受限效应, 即表面极化效应也进行了研究<sup>[1~2]</sup>. 但对因量子点的形状不同引起介电受限效应的变化而带来影响的研究的相对较少. 由于表面极化效应与界面的形状的关系是非常密切的, 所以我们在考虑表面极化效应的情况下, 计算了不同形状的量子点受限激子的基态能, 讨论了介电受限对不同形状量子点中受限激子的影响.

## 2 理论模型

设半导体量子点是各向同性介质, 介电函数为  $\epsilon_1$ , 电子和空穴被限制在势阱中. 在有效质量近似下, 假设导带和价带均为抛物线型, 则量子点中受限的 Hamiltonian 为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V + H_p$$

其中  $m_e^*$ ,  $m_h^*$  分别为电子和空穴的有效质量,  $\mathbf{r}_e$ ,  $\mathbf{r}_h$  分别为电子和空穴的空间坐标,  $V$  为受限势,  $H_p$  为表面极化项.

激子的有效 Schrodinger 方程为

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V + H_p \right] (\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = (E - E_g) (\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$$

其中  $E_g$  是体材料的带隙, 受限势  $V$  在量子点内是零, 在量子点外为  $V_0$ .

对于半径为  $R$  的球形量子点, 表面极化项<sup>[2]</sup>,

$$H_p = \frac{e^2}{2R} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \left( \frac{r_e}{R} \right)^{2n} + \left( \frac{r_h}{R} \right)^{2n} \right] - \frac{e^2}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{r_e r_h}{R^2} \right]^n P_n(\cos \theta_{eh})$$

$P_n$  是  $n$  阶 Legendre 多项式,  $\theta_{eh}$  是  $r_e$  和  $r_h$  之间的夹角. 半导体量子点和周围介质的介电常数分别为  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$ ,  $\epsilon$  为

$$\epsilon = \frac{(n+1)(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{\epsilon_1(n+1) + \epsilon_2}$$

且  $\epsilon = \epsilon_1 / \epsilon_2$ .

对于边长为  $2R$  的立方量子点, 表面极化项为<sup>[8]</sup>

$$\begin{aligned} H_p = & - \frac{e^2}{\epsilon_1} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon_1^{l+m+n}}{[(x_e - x_{hlmn})^2 + (y_e - y_{hlmn})^2 + (z_e - z_{hlmn})^2]^{1/2}} \\ & + \frac{e^2}{\epsilon_2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon_2^{l+m+n}}{[(x_e - x_{elmn})^2 + (y_e - y_{elmn})^2 + (z_e - z_{elmn})^2]^{1/2}} \\ & + \frac{e^2}{\epsilon_2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon_2^{l+m+n}}{[(x_h - x_{hlmn})^2 + (y_h - y_{hlmn})^2 + (z_h - z_{hlmn})^2]^{1/2}} \\ & = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2} \end{aligned}$$

$\epsilon_1$ 、 $\epsilon_2$  分别为量子点和周围介质的介电常数, 且

$$\begin{aligned} (x_{almn}, y_{almn}, z_{almn}) = & [2lR + (-1)^l x_a, 2mR + (-1)^m y_a, 2nR + (-1)^n z_a] \\ & (a = e \text{ or } h; l, m, n = -\infty, \dots, \infty) \end{aligned}$$

这里撇表示在求和中除去  $l = m = n = 0$  项.

设变分波函数为

$$\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi(\mathbf{r}_e) \psi(\mathbf{r}_h) \exp(-\mathbf{r}_{eh})$$

其中,  $\psi$  为变分参数,  $\mathbf{r}_{eh} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ ,  $\psi(\mathbf{r}_e)$ 、 $\psi(\mathbf{r}_h)$  为单粒子在受限势为  $V$  的势阱中波函数. 受限激子的基态能为

$$E_x = \frac{\langle \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) | H | \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \rangle}{\langle \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) | \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \rangle}$$

### 3 结果与讨论

在计算中以体激子的 Bohr 半径为量子点尺度的单位, 相应的有效 Rydberg 能量为能量单位. 设电子和空穴的有效质量之比为  $m_h^*/m_e^* = 5$ , 受限势  $V_0 = 100E_y^*$ .

图1、图2分别为量子点的介电常数为  $\epsilon_1 = 9.3$ , 周围介质的介电常数为  $\epsilon_2 = 2.5$  (如玻璃中的半导体量子点), 考虑表面极化效应和不考虑表面极化效应时在球形、立方量子点中受限激子的基态能与量子点尺度的关系.

从图中可以看到, 对于球形量子点, 当考虑表面极化效应以后, 受限激子的基态能变大, 而对于立方量子点, 考虑表面极化效应以后, 受限激子的基态能变小. 这是因为在所给定的量子点和周围的介电常数的情况下, 球形量子点的表面极化效应对受限激子基态能量引起的修正是正的, 而立方量子点的表面极化效应对受限激子基态能量的修正是负的.

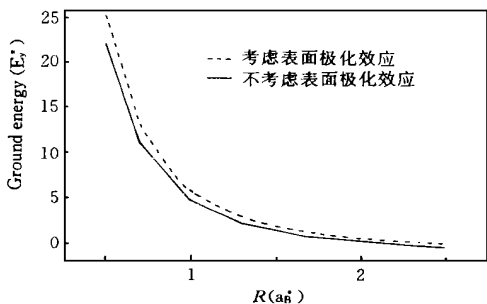


图1 在球形量子点中受限激子的基态能随其尺度  $R$  的变化曲线. 实线为考虑表面极化效应, 虚线为不考虑表面极化效应

Fig. 1 The ground energy of an exciton as function of the size  $R$  in sperical QD. The solid line is that ground energy with surface polarization. The dash line is that without surface polarization.

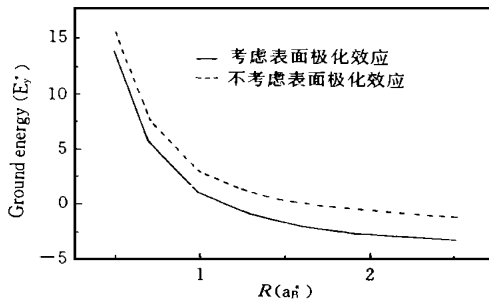


图2 在立方形量子点中受限激子的基态能随其尺度  $R$  的变化曲线. 实线为考虑表面极化效应, 虚线为不考虑表面极化效应

Fig. 2 The ground energy of an exciton as function of the size  $R$  in cubics QD. The solid line is that ground energy with surface polarization. The dash line is that without surface polarization.

为了比较不同形状量子点中激子的受限情况, 我们引入受限尺度  $R_0$  的概念<sup>[9]</sup>, 定义平均受限尺度为与量子点体积相等的球的半径. 表1给出了在平均受限尺度相同情况下, 球形和立方形量子点在考虑和不考虑表面极化影响时, 受限激子的基态能.

表1 在球形和立方形量子点中受限激子的基态能

Table 1 The ground energy of an exciton in sperical and cubic QD.

		基态能	平均受限尺度 $R_0$	基态能	平均受限尺度 $R_0$
球形	考虑表面极化	16.429	0.500	3.228	1.000
球形	不考虑表面极化	14.396	0.500	2.576	1.000
立方形	考虑表面极化	14.024	0.500	-0.892	1.000
立方形	不考虑表面极化	15.920	0.500	2.946	1.000

从表1可以看出, 在平均受限尺度相同时, 当不考虑表面极化效应的影响时, 球形与立方形量子点中受限激子的基态能级相差不大, 立方形量子点中受限激子的基态能高于球形量子点中受限激子的基态能, 这个结论与文献[9]在无限深势阱的情况下计算得出的结论是一致的. 当计入表面极化效应时, 由于表面极化效应的影响, 使得立方形量子点中受限激子的基态能比球形量子点中受限激子基态能小很多. 在立方形量子点中表面极化效应对受限激子基态能的修正为负的, 而在球形量子点中表面极化效应的修正为正的.

图3和图4分别为球形, 立方形量子点放在介电常数不同的介质中, 量子点中受限激子的基态能与量子点半径的关系. 从图中可以看到, 随着周围介质介电常数从小变大,

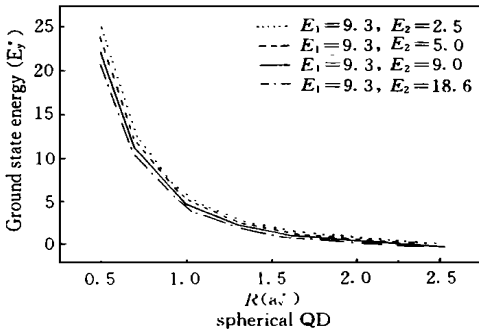


图3 球形量子点放在介质中,受限激子的基态能随其尺度 $R$ 的变化曲线.量子点的介电常数 $\epsilon_1$ 与不同介质的介电常数 $\epsilon_2$ 分别标于图中

Fig. 3 The ground energy of an exciton as function of the size  $R$  in sperical QD that is in different matrix. The dielectric constants of the QD  $\epsilon_1$  and the matrix  $\epsilon_2$  are separately marked in the figure.

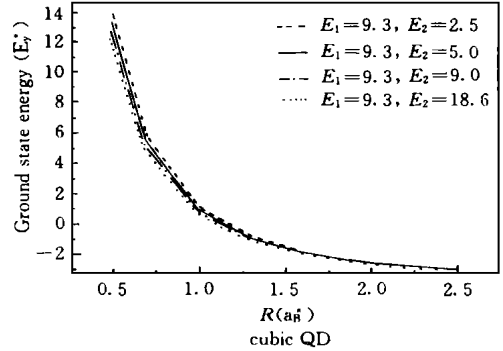


图4 立方形量子点放在介质中,受限激子的基态能随其尺度 $R$ 的变化曲线.量子点的介电常数 $\epsilon_1$ 与不同介质的介电常数 $\epsilon_2$ 分别标于图中

Fig. 4 The ground energy of an exciton as function of the size  $R$  in cubic QD that is in different matrix. The dielectric constants of the QD  $\epsilon_1$  and the matrix  $\epsilon_2$  are separately marked in the figure.

即随着量子点的介电常数 $\epsilon_1$ 与周围介质介电常数 $\epsilon_2$ 之比的增大,量子点中受限激子的基态能变得越来越高,这表明由于介电常数的间断性所引起的表面极化效应对激子的受限作用变得越来越大,即电力线穿透周围介质的机会变得越来越多.对于球形量子点通过理论计算可以得到,当量子点的介电常数 $\epsilon_1$ 大于周围介质的介电常数 $\epsilon_2$ 时,量子点内的电力线比量子点外的电力线稀;当量子点的介电常数 $\epsilon_1$ 小于周围介质的介电常数时,量子点内的电力线比量子点外的电力线密.从球形、立方形量子点的计算结果推断,对立方形量子点也应有同样的结论.由此可见,随着量子点的介电常数与周围介质的介电常数之比不断变大,介电受限效应变得越来越强.

通过以上的计算与讨论,可以看到考虑到量子点的形状效应,表面极化效应引起的介电受限是不可忽略的.

## 参 考 文 献

- [ 1 ] Yoffe A D. Adv. Phys., 1993, **42**: 173.
- [ 2 ] Brus L E. J. Chem. Phys., 1984, **80**: 4403.
- [ 3 ] Woggon U, Gaponekno S V. Phys. Status Solidi B, 1995, **189**: 285.
- [ 4 ] Laheld U E H, Einevoll G T. Phys. Rev., 1997, **B55**: 5184.
- [ 5 ] Kekdysh L V. Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1979, **29**: 716;  
(JETP Lett., 1979, **29**: 658; Superlatt. Microstruct., 1988, **4**: 637).
- [ 6 ] Kumagai M, Takagahara T. Phys. Rev., 1989, **B40**: 12359.

- [ 7 ] Banyai L, Galbraith L, Ell C *et al*, Phys. Rev., 1987, B36: 6099.  
[ 8 ] Takagahara T. Phys. Rev., 1993, B47: 4569.  
[ 9 ] 罗 莹, 王若帧, 马本荃. 北京师范大学学报, 1998, 34: 212.

## EFFECT OF DIELECTRIC CONFINEMENT ON AN EXCITON IN QUANTUM DOT

Luo Ying Wang Ruozhen Ma Benkun

(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875*)

### Abstract

Under the effective-mass approximation, the paper studies the effect of dielectric confinement on an exciton in spherical and cubic QD (quantum dot). The present result shows that effects of QD shape on excitonic states is not neglectful.

**Key words** dielectric confinement, quantum dot, exciton