

## 量子井戸中における励起子の結合エネルギー

## - Hermanson 誘電関数の効果 -

新潟大・自然科学、琉球大・教養 \*

安仁屋勝、深水孝則、\* 友寄友造、\* 与那城勝邦\*

(1988年11月28日受理)

## 要 約

我々は量子井戸中における励起子の結合エネルギーについて計算を行い、空間分散を持つ遮蔽の効果を調べた。計算は有効質量近似を用い変分法によって行った。空間分散を持つ遮蔽は  $\epsilon^{-1}(r) = \epsilon_0^{-1} + (1 - \epsilon_0^{-1}) e^{-r/a}$  という誘電関数で記述した。得られた結果を空間分散を持たない場合と比較した。その結果、量子井戸の幅が 30 Å 以下の場合、空間分散を持つ遮蔽は結合エネルギーを著しく増加させることが分かった。

ここ数年、半導体超格子や量子井戸等の理論的及び実験的研究が精力的になされてきた。特に GaAs と  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  の積み重ねからなる超格子は最も盛んに研究されている。 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  における Al の量により、そのバンドギャップは GaAs のそれと比べてかなり大きくなる。従って GaAs 層における電子と正孔はポテンシャル井戸中にあり、またその障壁の高さは  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  に含まれる Al の濃度に依存するものと考えることができる。

Dingle らによる先駆的仕事以来、量子井戸の光学的性質における励起子の重要性は多くの研究者から指摘され続けてきた。<sup>1)</sup> 良質の単一量子井戸及び多重量子井戸で見られる光吸収やフォトルミネッセンスは正孔のサブバンドと電子のサブバンド間の励起子遷移によって支配されている。<sup>2, 3)</sup> これらの実験を正しく解釈するには励起子の結合エネルギーの詳しい知識を必要とする。

---

 ANIYA Masaru, FUKAMI Takanori, TOMOYOSE Tomozo, YONASHIRO Katsukuni

GaAs と  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  のバンド構造はそれほど差がないので、励起子の結合エネルギーを求めるためには原理的に  $\Gamma_6$  電子と  $\Gamma_8$  正孔の運動を記述する  $4 \times 4$  行列の固有値を求めればよい。<sup>4)</sup> 物質がバルクである場合、この行列の非対角成分からの励起子結合エネルギーへの寄与は小さい。ここ数年の間に量子井戸における結合エネルギーの計算が数多くなされた。<sup>5, 6-9)</sup> Bastard らは GaAs-GaAlAs 量子井戸における励起子の基底結合エネルギーの計算を変分法を用いて行い、量子井戸の幅が増加するに伴って結合エネルギーが二次元的な値から三次元的な値へと減少することを示した。<sup>6)</sup> Miller ら及び Greene と Bajaj は量子井戸における励起子の問題を扱う際に、バルクで用いられる方法を部分的に使い励起子行列の非対角成分を無視して計算を行った。<sup>3, 7)</sup> 最近 Ekenberg と Alterelli によって励起子行列の非対角成分の寄与が結合エネルギーへ重要な補正を与えることが報告されている。<sup>9)</sup>

本研究の目的は空間分散をもつ遮蔽が量子井戸中における励起子結合エネルギーへ及ぼす影響を調べることである。

幅  $L$  をもつ半導体層にある電子と正孔を考えよう。 $z$  軸は層に垂直であるとする。ハミルトニアンは

$$H = E_g + \frac{P_x^2 + P_y^2}{2(m_e + m_{\pm})} + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2\mu_{\pm}} + \frac{p_{ze}^2}{2m_e} + \frac{p_{zh}^2}{2m_{\pm}} - \frac{e^2}{\epsilon(r) [x^2 + y^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}} + V_e(z_e) + V_h(z_h) \quad (1)$$

と書ける。ここで  $e$  は電荷を表し、 $P_x$ 、 $P_y$  と  $p_x$ 、 $p_y$  はそれぞれ重心と相対運動の運動量の  $x$ 、 $y$  成分である。 $p_{ze}$  と  $p_{zh}$  は電子と正孔の運動量の  $z$  成分、 $m_e$  は伝導電子の有効質量、 $m_{\pm}$  は重い正孔 (+) または軽い正孔 (-) の有効質量、 $\mu_{\pm}$  は重い正孔 (+) 又は軽い正孔 (-) と電子の換算質量である。 $E_g$  は GaAs のバンドギャップで、 $V_e(z_e)$  と  $V_h(z_h)$  はそれぞれ電子と正孔に対する障壁ポテンシャルである。また、 $\epsilon(r)$  は遮蔽効果を取り入れるための誘電関数である。我々の目的は空間分散を持つ遮蔽の影響を調べることにあるので、障壁ポテンシャルに対して次の近似を行った。

$$V_e(z_e) = \begin{cases} \infty, & |z| > L/2 \\ 0, & |z| < L/2 \end{cases} \quad (2)$$

$$V_h(z_h) = \begin{cases} \infty, & |z| > L/2 \\ 0, & |z| < L/2 \end{cases}$$

空間分散をもつ遮蔽は Hermanson によって導入された次の誘電関数を用いて取り入れる。<sup>10)</sup>

$$\frac{1}{\epsilon(r)} = \frac{1}{\epsilon_0} + \left(1 - \frac{1}{\epsilon_0}\right) e^{-r/a} \quad (3)$$

ここで

$$r = [\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}$$

$$\rho^2 = x^2 + y^2$$

である。また  $\epsilon_0$  は静的誘電定数で  $a$  は物質に特有な遮蔽定数である。式 (3) より電子と正孔の相互作用に対して、 $r \rightarrow 0$  で遮蔽がきかなくなり、また  $r \rightarrow \infty$  で  $\epsilon(r) \rightarrow \epsilon_0$  となることが分かる。Oliveira と Falicov はこの誘電関数を用い、GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As 量子井戸中におけるドナーとアクセプターの結合エネルギーを調べた。

$x-y$  面内においては並進対称性のため  $P_x$  と  $P_y$  は保存量である。従って  $P_x = P_y = 0$  とおける。式 (1) のハミルトニアンに対して Schrodinger 方程式の厳密解を求めることは不可能なので変分法を用いる。我々はテスト波動関数として次のものを選んだ。

$$\psi = \begin{cases} N \cos\left(\frac{\pi z_e}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi z_h}{L}\right) \exp\left\{-\frac{1}{\lambda}[\rho^2 + (z_e - z_h)^2]^{1/2}\right\}, & |z| < L/2 \\ 0, & |z| > L/2 \end{cases} \quad (4)$$

ここで  $\lambda$  は変分パラメータで  $N$  は規格化定数である。重い (+) あるいは軽い (-) 正孔を持つ励起子の結合エネルギーは次の式で与えられる。

$$E_{\pm} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 \mu_{\pm} L^2} - \min_{\lambda} \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (5)$$

ここで  $\min \langle \psi | H | \psi \rangle$  は  $\langle \psi | H | \psi \rangle$  を  $\lambda$  に対して最小化することを意味する。式 (5) に現れる積分は全て解析的に解くことができ、最小化のときにのみ数値計算を要する。我々は GaAs に対し、パラメータの値として、 $\epsilon_0 = 12.58$ 、 $a = 1.1a_0$ 、 $m_e = 0.067m_0$ 、 $m_+ = 0.45m_0$ 、 $m_- = 0.08m_0$  を用いた。<sup>11, 7)</sup> ここで  $a_0 = \hbar^2 / m_0 e^2$  は真空中における Bohr 半径で、 $m_0$  は自由電子の質量である。

計算結果は図 1 に示されている。図 1 (a) と (b) はそれぞれ重い正孔と軽い正孔をもつ励起子について、基底状態の結合エネルギーが量子井戸の幅にどのように依存するかを示している。破線は誘電関数を定数  $\epsilon_0$  とした場合、実線は空間分散を持つ

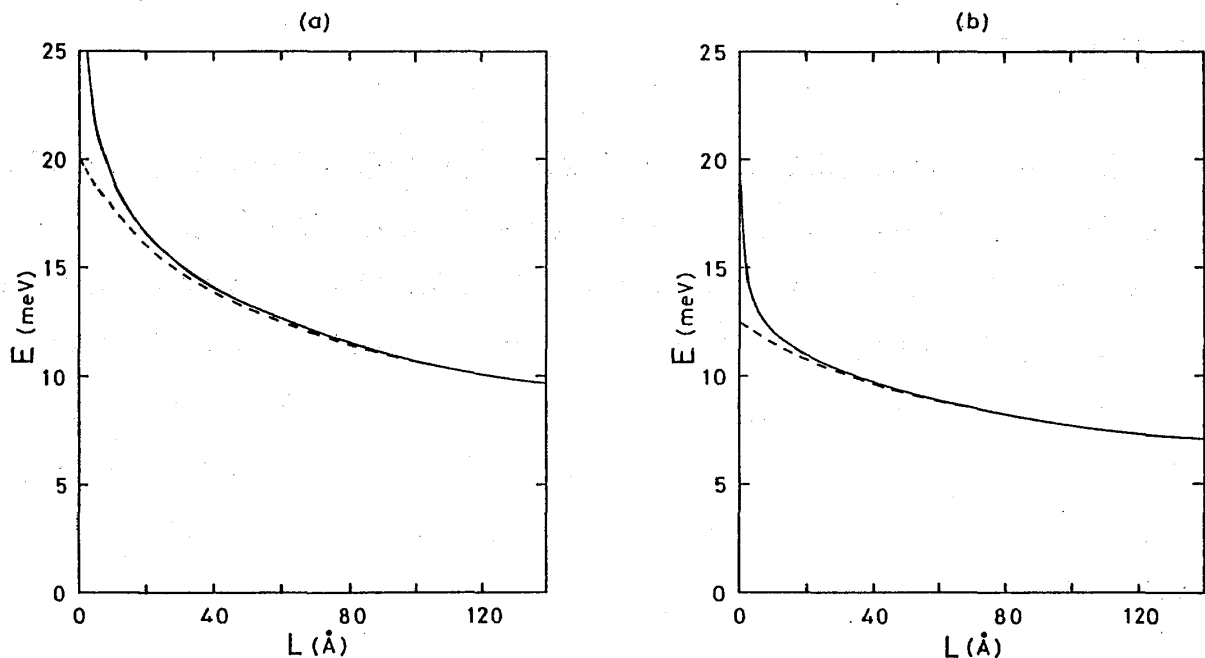


図 1 (a) 重い正孔をもつ励起子、(b) 軽い正孔をもつ励起子の量子井戸における結合エネルギー。L は井戸幅である。破線は誘電関数を定数  $\epsilon_0$  とした場合、実線は空間分散を持つ誘電関数  $\epsilon(r)$  の場合を表す。

つ場合を表す。図1から、幅の狭い ( $L < 30 \text{ \AA}$ ) 量子井戸において、空間分散をもつ誘電関数は結合エネルギーを強める効果をもつことが分かる。このことは次のように理解できる。水素原子様系を3次元的なものから2次元的なものへ近づけるにつれて Bohr 半径は減少し、このため我々の理論の範囲内では遮蔽効果の減少をもたらす。従って電子正孔間の相互作用は強くなり結合エネルギーが増大する事になる。あるいは GaAs 層の幅を増やすと励起子の波動関数は広がり、その結果空間分散をもつ誘電関数の影響は弱まる。同様な結果は量子井戸中における不純物に対しても見い出されている。

幅の狭い量子井戸においては GaAs と  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  の界面における有効質量と誘電関数のミスマッチ、有限障壁ポテンシャル等の影響は重要であるので、これらの効果を取り入れてみることも興味深い課題であると思われる。

## 参考文献

- 1) R.Dingle : festkorperprobleme, Advances in Solid State Physics, (Edited by H.J.Queisser), Vol.XV, p.21 Pergamon/Vieweg, Braunschweig (1975).
- 2) B.A.Vojak, N.Holonyak Jr., W.D.Laidig, K.Hess, J.J.Coleman and P.D.Dapkus : Solid State Commun. 35 (1980) 477.
- 3) R.C.Miller, D.A.Kleinman, W.T.Tsang and A.C.Gossard : Phys. Rev. B24 (1981) 1134.
- 4) G.Bastard : J. Lumin. 30 (1985) 488.
- 5) A.Baldereschi and N.C.Lipari : Phys. Rev. B3 (1971) 439.
- 6) G.Bastard, E.E.Mendez, L.L.Chang and L.Esaki : Phys. Rev. B26 (1982) 1974.
- 7) R.L.Greene and K.K.Bajaj : Solid State Commun. 45 (1983) 831.
- 8) Y.Shinozuka and M.Matsuura : Phys. Rev. B28 (1983) 4878. : Phys. Rev. B29 (1984) 3717.
- 9) U.Ekenberg and M.Alterelli : Phys. Rev. B35 (1987) 7585.
- 10) J.Hermanson : Phys. Rev. B150 (1966) 660.
- 11) L.E.Oliveira and L.M.Falicov : Phys. Rev. B34 (1986) 8676.
- 12) B.Zaslow and M.E.Zandler : Am. J. Phys. 35 (1967) 1118.