



LW007793

分类号_____

U D C _____

密级_____

编号_____

中国科学院研究生院

博士学位论文

量子阱和超晶格中的等离激元研究

刘 新 海

指 导 教 师: 顾本源 研究员 中国科学院物理研究所

申请学位级别: 理学 博士 学科专业名称: 凝聚态物理

论文提交日期: 2002 年 4 月 论文答辩日期: 2002 年 月

培 养 单 位: 中国科学院物理研究所

学位授予单位: 中国科学院 研究生院

答辩委员会主席: _____

目 录

摘要	iii
ABSTRACT	v
第一章 绪 论	1
§1.1 实验研究的方法及主要结果	2
§1.2 理论研究的方法及主要结果	6
1.2.1 理论模型	6
1.2.2 理论研究的主要结果	10
§1.3 本文的研究背景及主要工作	12
1.3.1 双量子阱中的等离激元研究	12
1.3.2 量子阱超晶格中等离激元的介电函数矩阵理论	14
第二章 量子阱系统中等离激元的理论推导	15
§2.1 介电函数张量理论的一般表达式	15
§2.2 量子阱中等离激元的介电函数张量理论	17
§2.3 交换-关联效应	19
第三章 双量子阱中的等离激元研究	21
§3.1 波函数的扩展和交迭效应对对称双量子阱中等离激元的影响	21
3.1.1 引言	21
3.1.2 公式	21
3.1.3 数值结果和讨论	23
§3.2 阱间耦合效应对对称双量子阱中等离激元的影响	26
3.2.1 引言	26
3.2.2 公式	26
3.2.3 数值结果及分析	29
3.2.4 结论	38

§3.3 隧穿耦合效应对不对称双量子阱结构中等离激元的影响	38
3.3.1 引言	38
3.3.2 公式和分析	39
3.3.3 数值结果和讨论	42
3.3.4 结论	43
§3.4 不对称双量子阱结构中的等离子激元	44
3.4.1 引言	44
3.4.2 公式	44
3.4.3 数值结果和分析	46
3.4.4 结论	50
第四章 超晶格中等离激元的介电函数矩阵理论	51
§4.1 电子气系统中等离激元的介电函数矩阵理论	51
§4.2 傅里叶空间中电子气系统的响应方程	53
§4.3 三种表象之间的变换关系	56
4.3.1 三种表象中电子气体的响应方程	56
4.3.2 三种表象之间的变换关系	57
§4.4 周期调制系统中电子气的响应方程	58
4.4.1 $\hat{H}_0$ 的本征矢空间中	58
4.4.2 傅里叶空间中	59
§4.5 量子阱超晶格中电子气的响应	61
4.5.1 $\hat{H}_0$ 的本征矢空间中 (一)	61
4.5.2 $\hat{H}_0$ 的本征矢空间中 (二)	62
4.5.3 傅里叶空间中	65
§4.6 阱间耦合对量子阱超晶格中等离激元的影响	65
总结	70
参考文献	72
攻读博士学位期间发表和待发表的论文	79
索引	80
致谢	83

摘 要

由于在揭示电子-电子相互作用机制方面的重要性, 半导体低维结构(超晶格、量子阱、量子线和量子点等)中的集体激发性质的研究是凝聚态物理研究的一个热点并且经久不衰。本论文系统地研究了双量子阱中等离激元的性质, 探讨了波函数的扩展和交迭效应、阱间耦合效应、不对称效应和交换-关联效应等对等离子激元的影响; 另外, 根据我们提出的介电函数矩阵理论研究了阱间耦合效应对量子阱超晶格中等离激元性质的影响, 获得了有意义的结果, 主要有:

[1] 研究了波函数的扩展和交迭效应对 对称双量子阱中等离激元的影响, 对二维层状气体 (2DLG) 模型下的近似结果与考虑电子波函数扩展和交迭效应时的结果进行了比较, 探讨了 2DLG 模型的适用性。还发现带间等离子激元模的长波能隙正比于基态与第一激发态之间的间距 Δ_{SAS} , 而不是与 $\sqrt{\Delta_{SAS}}$ 成正比。

[2] 采用一种新的自洽方法计算了 对称双量子阱的能级和波函数, 其中电子密度、调制掺杂区电离层的厚度等参数是根据材料的性质、生长条件等自洽确定的。利用求得的能级和波函数在无规相近似下计算了对称双方形量子阱中的等离子激元, 分别在库仑耦合和隧穿耦合范围内详细地研究了阱间耦合对等离子激元色散关系的影响。计算了不同耦合强度下的退极化移动, 结果表明随着耦合强度的增加, 多体效应变强。

[3] 研究了隧穿耦合对 不对称双量子阱中集体电荷密度激发的影响, 预言除了光学等离子激元模外, 还可能存在另一支子带内的激发模, 在弱隧穿耦合下, 它是非阻尼的, 具有声学的色散关系。随着隧穿耦合的增加, 它逐渐靠近并最终落入 (0-0) 单粒子激发区。同时发现, 在强耦合时, 子带间等离子激元模位于 (1-0) 单粒子激发区上面, 随着隧穿耦合的减小, 它逐渐靠近 (1-0) 单粒子激发区并最终被阻尼掉。

[4] 计入交换-关联修正, 在与时间有关的局域密度近似下系统地研究了不对称程度、隧穿耦合和交换-关联效应对 不对称双量子阱中等离激元色散关系的影响。发现随着不对称性或势垒厚度的增加, 原本阻尼的子带内的等离子激元模 ω_- 逐渐移出了 (0-0) 单粒子激发区, 而子带间的等离子激元模 (ω_{10}) 则逐渐向 (1-0) 单粒子激发区靠拢并被阻尼掉。在适当的条件下, ω_- 和 ω_{10} 能够与光学等离子激元模共存。交换-关联效

应随电子密度的降低而增强，当电子密度低到一定程度时，交换-关联效应变得很重要。还计算了集体激发模的光谱权重，探讨了实验上观测到 ω_- 模的可能性。

[5] 在等离子激元介电函数张量理论的基础上，首次导出了介电函数矩阵理论的一般表达式，建立了两种理论之间的表象变换关系。将我们的介电函数矩阵理论应用到量子阱超晶格中，分别在单电子哈密顿量的本征矢空间和傅里叶空间中导出了确定量子阱超晶格中等离子激元色散关系的三组方程，研究了阱间耦合效应对等离子激元的影响。

关键词： 等离子激元，双量子阱，量子阱超晶格，介电函数张量，介电函数矩阵

Studies on Plasmon Modes in Quantum-well Structures and Superlattices**ABSTRACT****Xin-Hai Liu (Condensed Matter Physics)****Directed by Professor Ben-Yuan Gu**

Due to its importance in revealing the electron-electron interaction mechanisms, properties of collective excitations in low-dimensional semiconductor structures such as superlattices, quantum wells, quantum wires, and quantum dots have received much attention and extensive studies for many years. In this thesis, we systematically investigate the characteristics of plasmons in double-quantum-well (DQW) structures, and discuss the effects of extension and overlap of wave functions, inter-well coupling, spatial asymmetry, and exchange-correlation correction on the dispersion relations of the plasmon modes. In addition, we present a general expression for the dielectric matrix of an electronic gas. Using the proposed dielectric matrix theory in quantum-well superlattices, we study the effects of inter-well coupling on the plasmon modes. The most valuable results obtained in this thesis are summarized as follows:

[1] We investigate the effects of extension and overlap of wave functions on the dispersion relations of plasmon modes in symmetric DQW structures. We compare the approximate results in two-dimensional layer-gas (2DLG) model with the exact ones where the extension and overlap of the wave functions are considered and discuss the validity of the 2DLG model. We also show that the long wavelength gap of the inter-subband mode is proportional to the energy spacing between the ground and the first excited energy levels Δ_{SAS} rather than to $\sqrt{\Delta_{SAS}}$.

[2] Adopting a new self-consistent method, we calculate the energy levels and wave functions of symmetric double-square-quantum-well (DSQW) structures where the electronic density and the depletion lengths in the modulation-doped regions are determined self-consistently according to the properties of the materials and the growth conditions. Using the obtained energy levels and wave functions, we calculate the plasmon modes in symmetric DSQW structures in random-phase approximation. We systematically investigate the effects of inter-well coupling on the plasmon spectrum both in the Coulomb coupling and the tunneling coupling regimes. We calculate the depolarization shift in different coupling strengths and find that the dynamical many-body effects become stronger with the increase of the tunneling coupling strength.

[3] We study the effects of tunneling coupling on the collective charge density excitations in asymmetric DQW structures and predict that in addition to the optic mode ω_+ , there may exist another intra-subband mode ω_- . In weak tunneling regime, this mode is undamped and has an acoustic-like dispersion relation in the long-wavelength limit. With the increase of the tunneling strength, ω_- gradually approaches the (0-0) single-particle continuum and becomes Landau damped. We also find that in strong tunneling regime, the inter-subband mode ω_{10} lies above the (1-0) single-particle continuum. With the decrease of the tunneling strength, this mode gradually moves to the (1-0) single-particle continuum and becomes damped.

[4] Taking the exchange-correlation correction into account, we investigate the effects of spatial asymmetry, tunneling coupling, and exchange-correlation on plasmon modes in asymmetric DQW structures in time-dependent local-density approximation. We find that when we increase the degree of spatial asymmetry or the width of the inter-well barrier, the originally damped intra-subband mode ω_- moves out of the (0-0) single-particle continuum whereas the inter-subband mode ω_{10} gradually draws close to the (1-0) continuum and becomes damped. These two modes as well as the optic-like intra-subband mode ω_+ can coexist at certain conditions. We find that the exchange-correlation effects increase with the decrease of the electronic density. When the electronic density lowers to certain extent, the exchange-correlation effects become remarkably important. We also calculate the spectral weight for the excitations and discuss the possibility of observing the ω_- mode in the inelastic light scattering experiments.

[5] Based on the dielectric tensor theory of plasmons, we first derive the general expression for a dielectric matrix theory and establish the representational transformation between these two theories. Using our dielectric matrix theory in quantum-well superlattices, we deduce three sets of equations for determining the dispersion relations of the plasmon modes in eigenspace of the single-particle Hamilton and Fourier space, respectively. The effects of inter-well coupling on the plasmon modes are studied in detail.

Key words: Plasmon, double-quantum-well, quantum-well superlattice, dielectric tensor, dielectric matrix

第一章 绪 论

固体材料是由大量粒子（如电子、离子）所组成的，这些粒子之间存在着相互作用，是一个复杂的多体系统，粒子之间的相互作用机制是一个基本而重要的物理问题，决定着固体材料的基本性质。人们把固体物理学研究的问题概括成两个方面：一个方面是与系统的基态有关的，如晶体的结构、结合能、磁有序结构等；另一个方面是与系统的激发态有关的，如固体的热学性质和弹性取决于原子偏离平衡位置的小振动，金属、半导体的导电行为取决于少量电子的激发等。最重要的激发态是能量靠近基态的低激发态，它们往往可以看成是一些独立的基本激发单元的集合，这些基本激发单元称为元激发 (elementary excitations)，它们具有确定的能量，有时还有确定的动量。元激发大体上可以分为两类：一类是集体激发 (collective excitations) 的准粒子，另一类是单粒子激发 (single-particle excitations, SPE) 的准粒子 [1]。

互作用电子气系统中除了大家熟悉的电子的个别激发外，也存在着电子的集体激发，其中最重要的是电荷密度激发 (charge density excitations, CDE)，即等离激元 (plasmons)。我们以金属中的电子为例进行说明，价电子在离子的正电抵消背景上运动，系统在宏观尺度上保持着电中性。由于价电子易动，而且电子间有相互作用，因此系统在微观尺度上必然存在着电子密度的起伏。鉴于电子间相互作用是库仑势，具有长程作用的特征，所以那怕是局域密度起伏也将在整个系统中产生电子运动的关联，这是一种集体效应。人们常采用系统中电子密度的傅里叶分量 ρ_q 作为集体坐标来描述这种关联。与晶格振动问题中的集体坐标相类似，在这里 ρ_q 将以波动的形式出现，它是系统中电子密度起伏相对于正电背景的振荡，称为等离子区集体振荡。波矢为 q 频率为 ω_q 的等离子区集体振荡量子 $\hbar\omega_q$ ，在固体物理中叫做等离激元 [2]。由于等离激元是由电子之间相互作用的长程部分激发的，因而系统中等离激元的性质可以揭示出电子-电子相互作用的机制，而电子之间的相互作用对系统的许多性质有决定性的影响，如系统的基态能、分数量子霍尔效应 (fractional quantum Hall effect)、维格纳晶化 (Wigner crystallization)、莫特转变 (Mott transition) 及输运性质等 [3]。高温超导体的超导机制也被发现与等离激元有关，一种观点认为等离激元增加了库伯电子对的相干长度，因而提高了超导体的临界温度 [4]。另外，在很多实验中，如近场光学实验和用隧道扫描显微镜研究物质表面的结构时 [5]，表面等离激

元起着非常重要的作用。因此，等离激元方面的研究既有理论上的意义又有实验上的价值。

随着分子束外延 (MBE) 等超薄生长技术的发展和完善，人们已经能够制备出预定掺杂和组分分布的半导体结构。由于生长环境清洁，生长速度慢，生长温度低，可随意改变外延层的组成和掺杂，可在原子尺度范围内精确地控制外延膜的厚度、界面平整度和掺杂分布，对材料的能带结构可以按照需要进行人工剪裁，对不同材料体系可以组合生长，制备出区别于天然半导体的崭新的人工材料，如半导体异质结、超晶格、量子阱、量子线和量子点等。与三维固体材料相比，这类低维材料呈现出许多物理内涵丰富的新的性质和现象 [6]。低维结构中等离激元的性质也明显不同于三维系统：三维系统中等离激元的长波频率有一个能隙，而在二维和一维系统中，等离激元的长波频率趋于零，因而在实验中更容易被激发 [7]；由于系统维度的降低了，诱导的电荷密度的维度也随之降低，但电子之间的相互作用仍保持三维系统中的形式 [8]，因而电子之间的相互作用和多体效应显得更为重要。以上两点再加上半导体低维系统的结构和性质可以在很大程度上自由控制，为实验和理论的对比提供了方便，使得低维系统成为研究电子-电子相互作用机制和多体效应的理想实验对象，引起了人们广泛的研究兴趣，近三十年来经久不衰。

§ 1.1 实验研究的方法及主要结果

实验上探测电子气系统中元激发的方法主要有两种：远红外吸收光谱 (far-infrared absorption spectroscopy) 方法和共振非弹性光散射 (resonant inelastic light scattering) 方法或称为 Raman 散射 (RS) 方法。在七十年代，远红外吸收光谱方法曾被广泛用来研究硅反型层中电子的集体激发 [9]。但这种方法有明显的缺点，在高对称性系统中只能观察到集体的电荷密度激发而不能观测到自旋密度激发 (spin density excitation, SDE)。远在低维时代到来之前，非弹性光散射方法就被证明是研究三维系统中单粒子和集体激发谱的一种非常成功的方法。贝尔实验室的 Pinczuk 改善和发展了该项技术，使之成功地应用到了低维系统中，给非弹性光散射方法带来了重大突破，成为研究低维系统中电子气体元激发谱的最有效的工具 [10]。与远红外吸收光谱方法相比较，非弹性光散射方法的优点是既能测量单粒子激发，又能测量集体的电荷密度激发和自旋密度激发。当入射和 Raman 散射光子的极化相互平行时（极化谱），可测得系统的电荷密度激发；而当两者的极化相互垂直时（退极化谱），可得到系统的自旋密度激发 [11]。单粒子激发在极化谱和退极化谱中都能被观测到 [12]。由于交换-关联效应 (exchange-correlation effect)，SDE 的能量低于单粒子激发，长波下两者的能量差被称为激子移动 (excitonic shift)。CDE 和 SDE 之间的能量差反映了退极化移动 (depolarization shift) 的大小，这种移动是由直接的库仑相互作用引起的 [10]。

应用 RS 方法, Pinczuk 等人 [13] 在调制掺杂的 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 超晶格中首次观察到了多层二维电子气体 (2DEG) 子带间的激发, 确定了子带间的能级间距。极化谱中一些解释不了的效应被归结为可能与系统中电荷之间的库仑相互作用有关。1980 年, Pinczuk 等人 [14] 首次在第一类超晶格中观测并估计了与 2DEG 子带间跃迁有关的退极化效应, 激发了人们用 RS 方法研究二维系统中多体效应的广泛兴趣。Pinczuk 等人 [15] 报道了 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ($x = 0.2$) 多量子阱的 Raman 散射 (RS) 实验结果, 令人惊奇的是, 他们发现光激发并未改变能级结构, 表明当浓度高达 $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时电子和空穴在空间上仍未分离开来。由于不同阱内的激发之间的耦合以及与 LO 声子的耦合, 他们测得的集体激发表现出复杂的行为。在 $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 的多量子阱结构中, Olego 等人 [8] 分别测量了参数为 $a = 262 \text{ \AA}$, $b = 628 \text{ \AA}$, $x = 0.20$, $n = 7.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 周期数为 20 和 $a = 245 \text{ \AA}$, $b = 258 \text{ \AA}$, $x = 0.11$, $n = 5.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 周期数为 15 的多量子阱结构中的集体激发谱。1985 年, Sooryakumar 等人 [16] 在由 30 个周期的 $\text{GaAs-Al}_{0.23}\text{Ga}_{0.77}\text{As}$ 量子阱超晶格中首次同时获得了子带内的集体激发与子带间的集体激发的散射谱。

Pinczuk 等人 [17] 用 RS 方法研究了 $\text{GaAs (258 \AA)-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As (520 \AA)}$ 多层量子阱结构, 在有限周期数 ($N = 15$) 的层状 2DEG 中观测到了分立的等离激元模。在 GaAs 层厚度 $a = 258 \text{ \AA}$, $\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.76}\text{As}$ 层的厚度 $b = 520 \text{ \AA}$, 各层的电子面密度 $n_s = 4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 电子迁移率 $\mu = 9 \times 10^4 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的系统中, 他们测得最低的两个子带间的间距为 13 meV, 第一激发态的电子密度 $n_s < 0.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, 观测到的谱为典型的等离激元双态, 这被解释为超晶格第一布里渊区内垂直波矢分别为 q_β 和 $(2\pi/d - q_\beta)$ ($\beta = 1, 2, \dots, N$) 的模之间简并的消除。Fasol 等人 [18] 也在五个周期的 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 多量子阱系统中作了 RS 测量, 报道了分立的等离激元模, 证实了各层的电子之间通过库仑相互作用发生了耦合。将实验观测的色散谱与 Jain 的理论相比较, 他们发现 $n = 1-3$ 的模符合得很好, $n = 5$ 的理论色散曲线在一定程度上偏离了测量值, 没有任何一支测量模与理论计算的 $n = 4$ 的模相对应。这些偏差被认为是由于在理论计算中假设电子层无限薄而实际样品中电子层有一定厚度引起的。他们还在相同的样品中测量了 SPE 对 $q_{||}$ 和温度的依赖关系, 利用唯象的弛豫时间 τ_{sp} , Raman 谱可由 Lindhard 响应函数给出很好的解释。在 30 个周期的 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ($x = 0.3$) 多量子阱结构中, Oberli 等人 [19] 应用时间分辨 (time-resolved) 的 RS 技术研究了纵向声子对电子子带间激发的散射机制, 确定了最低子带上电子的寿命和子带间的散射时间, 发现 215 $\text{\AA}$ 的多量子阱结构中第二个子带上的光激发电子有相对比较长的寿命。在 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ ($x = 0.3$) 多量子阱系统中, Fasol 等人 [20] 对带内和带间等离激元模之间的耦合进行了深入的实验和理论上的研究, 发现观测谱与无规相近似 (RPA) 理论符合得很好, 表明在由 N 个量子阱组成的、每个阱有 M 个子带被占据的结构中, 阱内相互作用将等离激元分裂成 M 组, 阱间的库仑相互作用又将其中的每一组模分裂为 N 个本征模。

当平面内波矢较小时，交换库仑相互作用使自旋密度激发偏离单粒子跃迁能量，而退极化效应 (depolarization effect) 和交换项则导致电荷密度激发的能量移动。然而，由于交换相互作用被认为在 GaAs 中很小，SDE 以前被解释为量子阱态之间的能级差，能量与 SPE 相同。类似地，CDE 相对于单粒子跃迁能量的移动被认为是由直接的库仑相互作用和与光学声子之间的耦合引起的。在 RS 实验中，Pinczuk 等人 [12] 根据实验测量的结果对上述已被广泛接受的观点提出了质疑。在小波矢范围内的子带间的激发谱中，他们发现除了 CDE 和 SDE 的集体激发峰外，还存在意料之外的单粒子跃迁。根据对三种激发能量的分析，他们定量地确定了库仑相互作用的大小，其中交换项和直接的库仑相互作用项大小差不多。Gammon 等人 [21] 报道了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 多量子阱结构中准二维电子气体 (Q2DEG) 的非弹性光散射的实验结果，测量了子带间的自旋密度和电荷密度激发的光谱。应用局域自旋密度近似将交换-关联项包含进来，他们用自洽方法计算了自旋密度波的色散关系，发现实验和理论结果之间符合得很好。

Ernst 等人 [22] 在 GaAs 量子阱中进行了 RS 测量，揭示了超低密度 2DEG 中电子-电子相互作用的一种新的多体现象。他们通过对基本激发能量的定量分析，发现在密度约为 $2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 的低密度范围内，SPE 和 CDE 之间有交叉现象，说明此时激子移动超过了退极化移动。最近，Hirjibehedin 等人 [23] 用非弹性光散射方法探测了 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 单量子阱系统中超低密度 2DEG 的等离激元色散谱，三个样品的阱宽均为 $w = 330 \text{ \AA}$ ，电子密度分别为 $4.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ， $1.3 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 和 $7.7 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ 。结果表明在低温下关联效应在电子之间的相互作用中占主导地位。

为了研究非抛物性效应对子带间激发的影响，Brozak 等人 [24] 在周期的二维 GaSb-AlSb 超晶格中作了 RS 测量，其中二维电子-空穴等离子体的光激发密度是通过改变入射激光的功率来控制的。他们对实验测量的结果与依赖时间的局域密度近似 (TDLDA) 下理论计算的结果进行了比较，发现只有当考虑 GaSb 导带的非抛物性效应时二者才能定量地符合。在 P 型 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 多量子阱中，Kirchner 等人 [25] 通过共振 RS 观测到了空穴子带间跃迁的激发能量的特征移动，这种移动被认为可能是由价带的非抛物性和阱宽的起伏引起的。他们指出这两种贡献可以通过沿超晶格轴向方向施加磁场区分开来，结果表明零磁场时观测到的移动主要是由子带的非抛物性引起的。在 InAs-AlSb 量子阱中，Richards 等人 [26,27] 对等离子体-LO 声子的耦合模进行了 RS 测量，重点强调了 InAs 导带非抛物性的重要性。他们证实在强光照条件下，电子密度可能高达 $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ，使得第二个子带被相当多的电子占据。在这样的条件下观测到的等离激元模是由第二个和第三个受限子带之间的跃迁引起的，而不是人们以前认为的第一个和第二个子带之间的跃迁。

传统的理论和实验预言在长波近似下宽量子阱中子带内和子带间的集体激发模是耦合在一起的，但在窄量子阱中并非如此。Abstreiter 等小组研究了窄阱结

构 [28–30], 阱宽仅为 $50 \text{ \AA}$ 左右, 阱深大约 300 meV , 在这样的结构中, 第一激发态的能量接近于阱的顶端, 使得子带间集体激发的峰有明显的展宽, 这种结构可以用来研制 $50\text{--}150 \text{ meV}$ 范围的超快红外探测器。Peng 和 Fonstad [31] 用可分辨极化的 (polarization-resolved) 远红外方法研究了 δ -掺杂的 $\text{AlAs-In}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As-AlAs}$ ($3\text{--}4\text{--}3 \text{ nm}$) 单量子阱中准 2DEG 的集体激发, 指出通过增加量子阱的能量差因而减小两种跃迁过程之间耦合的几率, 实现截然分开的子带内和子带间的集体激发是可能的。另外, 通过仔细分析集体激发的极化特性, 可以将集体激发和子带内以及子带间的单粒子激发区分开来。对于未来的基于子带间光谱的探测器和调制器的设计, 这些结果有重要的应用价值。

在电子-电子相互作用机制的研究方面, 双量子阱 (DQW) 结构得到了人们特别的关注和重视, 这主要是因为 DQW 中, 电子的动能受到抑制, 关联效应占主导地位, 会导致许多有趣的新现象出现, 如分数量子霍尔效应和维格纳晶化等。另外, 在双层系统 (DLS) 中, 由于层间的电子-电子相互作用产生的摩擦力, 当一层中有电流时, 会使另一层中也产生电流 [32]。牵引力 (drag force) 的大小是研究这些重要的电子-电子相互作用的方便、直接而敏感的探测手段。

测量 DQW 中库仑关联方面比较有趣的实验有 2DEG 与 3DEG 之间 [33]、两 2DEG 之间 [34]、2DEG 和 二维空穴气体 (2DHG) 之间 [35] 以及存在垂直磁场时两层 2DHG 之间 [36] 库仑牵引 (Coulomb drag) 效应的测量等。不存在磁场时, 电子-电子相互作用对牵引率 (drag rate) τ_D^{-1} 的贡献一般被归结为库仑过程, 但通过声子的电子-电子相互作用也被认为可能是重要的。在低温和存在磁场时, 测得的牵引率的大小比零磁场时增大了两个数量级 [36]。由于等离激元对电子关联很敏感, 库仑牵引实验也被认为是探测双层系统中等离激元的一种灵敏的方法 [37]。不久前, Hill 等人 [38] 在 $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ 双量子阱系统中进行了库仑牵引实验的测量, 发现等离激元增强了库仑牵引效应。在一篇综述文章中, Rojo [3] 回顾了近几年来耦合的电子系统中库仑牵引效应方面实验和理论上的进展, 指出通过互阻 (transresistance) ρ_D 的研究, 不但能得到电子之间直接的库仑相互作用方面的信息, 还能获得耦合系统中集体激发模以及声子的一些性质, 因而引起了人们广泛的兴趣和重视。

Decca 等人 [39] 在 $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 双量子阱中的非弹性光散射实验结果表明, 当两个子带都被大量电子占据时, 自旋密度激发和单粒子激发所对应的峰将重合在一起, 不能区分开来。他们将这种现象归结为一种新的电子-电子相互作用。

当系统的维度或有效电子密度降低时, 电子之间的关联效应将变得非常重要, 导致许多新的现象出现, 如量子霍尔效应 (fractional quantum Hall effect) 等 [10]。研究表明, 当电子的密度达到某一临界值 $n_s \sim 0.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时, 交换-关联引起的多体激子效应会导致 DQW 的基态不稳定 [40, 41]。这里的不稳定性指的是在长波极限下子带间 SDE 的能量突然降为零。Pellegrini 等人 [42] 利用 RS 散射方法测量了 DQW

中稀薄的电子气体的子带间 SDE，发现偶数 ν 的量子霍尔态在长波下发生了明显的软化现象。然而在零磁场时，Plaut 等人 [43] 在 DQW 中却并没有发现 TDLDA 所预言的不稳定的子带间 SDE 模。他们分别在 TDLDA 和非局域理论 (Bethe-Salpeter 理论) 框架下计算了 SDE 的频率随电子密度的变化关系，发现后者与实验结果符合的更好。他们认为 TDLDA 在极低电子密度下不再适用，因为此时的电子气体即使在局域尺度内也不能再被视为均匀的。

Bhatti 等人 [44] 用 RS 实验研究了施加横向偏压时 2DEG 中集体激发的性质。除了通常的带内等离激元模外，他们还观察到了一支能量较低的具有声学色散关系的模。他们认为在电流注入结附近形成了另一层电子气体，观察到的两支模分别对应于双电子层的光学和声学等离激元支。

最近，Kainth 等人 [45–47] 用 RS 方法对 DQW 结构中等离激元的色散关系进行了测量，同位相模（光学等离激元支）和反位相模（声学等离激元支）都被观测到了。他们用 Hubbard 近似下的 RPA 对观测到的声学等离激元的 Landau 阻尼随温度的变化进行了理论模拟，发现理论模拟定性地与测量结果一致，但在较高的温度下偏离测量值，说明此时需要更好的理论框架。

§ 1.2 理论研究的方法及主要结果

1.2.1. 理论模型

（一）宏观理论模型

被广泛用来研究等离子体激发的宏观模型包括流体动力学模型 (HDM)、转移矩阵方法 (TMM) 和最近提出的界面响应理论 (IRT) 等 [10]。

1. 流体动力学模型 (hydrodynamic model)

用流体动力学模型研究电子气体的想法源于 Bloch，这种方法提供了在等离子体介电函数 $\epsilon(q, \omega)$ 中包含空间散布的最简单的方法。流体动力学方法的核心思想是当系统被扰动时，系统向平衡态弛豫的过程很快，始终保持“局域平衡”，因而向全局平衡的弛豫可以用宏观变量来描述。在历史上，HDM 是从简并电子的流体动力学运动方程导出的 [48]。与（非局域的）微观理论相比，HDM 的优点是简单并可以给出解析结果，但不能将电子-空穴的激发和子带间的激发考虑进来。Feibelman [49] 在研究表面电磁波时对 RPA 和 HDM 的理论结果进行了定量的比较，讨论了 HDM 以牺牲表面介电响应的处理能力来换取简单的解析结果是否代价过高这一问题。用于研究简并的自由电子气体的 HDM 方法有严重的缺陷，即它只有当频率 $\omega \ll \nu$ (ν 为碰撞频率) 和 $\omega \gg \nu$ 时才成立，但前不久

这种方法已经被推广到任意频率 [50]。HDM 方法已被用来研究二维、一维和零维系统中的等离激元以及电场调制的 2DEG 中的等离激元等。

2. 转移矩阵方法 (transfer matrix method)

从 Lord Rayleigh 的时代起, TMM 就常被用来研究多层系统的电磁性质和多阱系统中的隧穿现象。在一篇经典的文章中, Abelés 简化了 Rayleigh 的处理方法, 发展了 TMM 具体的理论框架。自此以后, TMM 成为在局域近似下研究多层 (周期性的或非周期性的) 系统中波动现象的最受欢迎的方法之一。多层系统的所有性质都包含在转移矩阵 $\vec{T}$ 中。当不存在阻尼时, 它是幺正的, 即满足 $\det|\vec{T}| = 1$, 这是因为 $\vec{T}$ 是若干幺正矩阵的乘积。 $\vec{T}$ 的这种幺正性所产生的直接结果是它的本征值满足 $\lambda_1\lambda_2 = 1$ (假设 $\vec{T}$ 是 2×2 的矩阵)。TMM 已被大量的研究者用来研究量子阱和超晶格系统中的声子、等离激元、磁子和磁等离激元等。

3. 界面响应理论 (interface response theory)

IRT 是最新提出的宏观理论, 它是 1986 年 Dobrzynski [51] 在研究复合系统 (composite systems) 时引入的。IRT 中的响应函数 (或格林函数) 是根据各子系统的体响应函数 (bulk response function) 和界面响应算符 (interface response operator) 计算出来的。这些算符是对所有子系统相应的理想自由表面的分裂算符 (cleavage operator) 和所有界面耦合算符的响应的叠加, 根据获得的响应函数原则上能导出系统的所有物理性质。这些响应函数在光散射以及许多其它物理现象的理论研究中起着重要的作用。IRT 理论框架下的数值处理拥有其它宏观理论的一些有趣的特征, 例如, 将频率 (波矢) 处理为复变量能确定集体激发的寿命 (传播长度)。相对于其它的宏观方法, IRT 的优势是它能以一种精巧而紧凑的方式导出想要的结果。在 $N (\geq 2)$ 层系统中的体等离激元-极化子模和表面等离激元-极化子模的研究方面, 不论是零磁场下还是当存在各种构形的磁场时, IRT 都已经取得了很大的成功。最近, IRT 已经被推广到了各种各样的 2D 系统中 [52, 53]。正如其他的宏观理论一样, IRT 不能计入量子效应。然而, IRT 的理论框架不依赖于任何特定的模型。例如, 我们可以通过应用由 HDM 求得的介电张量矩阵元将空间散布效应包括进来, 通过允许介电张量矩阵元虚部不为零将阻尼效应包括进来, 通过考虑背景介电常数的频率依赖关系把与光学声子的耦合效应包括进来, 以及将推迟效应包括进来等。

(二) 微观理论模型

凝聚态物理中的每一主题都在一定程度上涉及到电子-电子相互作用的问题。均匀或不均匀系统中的集体激发是多粒子系统的一个重要特点。均匀和不均匀系统的根本区别在于沿不均匀方向的波矢分量不守恒, 不能通过相应坐

标的傅里叶变换对基本方程进行简化。在求解集体激发时，必须导出非局域的动态介电函数 $\epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ 。为了获得系统的介电函数，首先需要导出适当的密度-密度响应函数 (density-density response function) 或电流-电流响应函数 (current-current response function)，所用的方法有 Hartree-Fock 近似 (HFA)、RPA、自洽场近似 (SCFA)、Hubbard 近似、STLS 近似、图解微扰理论 (DPT)、运动方程方法 (EMM)、和密度泛函理论 (DFT) 等 [10]。

1. Hartree-Fock 近似

HFA 是计算多粒子性质的首次尝试，相对于 Hartree 近似是一个很大的进步。Hartree 近似的一个缺点是不能给出正确的结合能 (cohesive energy)，这是因为它完全忽略了电子之间的排斥相互作用，两个电子能够占据同一个态。Hartree 近似的另一个缺点是不能包含泡利不相容原理，即电子的波函数不是反对称的。Hartree-Fock 近似正确考虑了泡利不相容原理，但只包含了库仑相互作用的交换项，没有考虑相互作用对电子态的影响，导致相关能 (correlation energy) 计算的发散困难。为了消除发散，必须在集体运动的基础上考虑屏蔽效应。

2. 无规相近似 (random phase approximation)

RPA 是由 Böhm 和 Pines 于五十年代初在计算非局域的动态介电函数 $\epsilon(q, \omega)$ 时引入的。该近似的名称来源于推导 ρ_k (密度起伏的傅里叶变换) 的运动方程时假设 $\rho_{k-l} = \sum_i \exp[-i(k-l) \cdot r_i] \cong N\delta_{kl}$ ，这是因为当 $k \neq l$ 时， ρ_{k-l} 是位相无规变化的指数相之和，相对于 $\rho_0 (= N)$ 来说是小量，可以忽略。更严格的说法是通过只保留库仑相互作用中动量转移为 k 的分量来确定系统的性质。也就是说，在对电子-电子或电子-等离激元之间的相互作用作 RPA 近似时，忽略了不同动量转移之间的耦合。从介电函数的倒数 (IDF) 的推导过程可以看出 RPA 和 HFA 的区别在于 RPA 介电函数是电子对有效场的响应，而 HFA 介电函数则是电子对外场的响应。需要注意的是 RPA 有很多别名，如 SCFA，依赖时间的 HFA 等。

3. Hubbard 近似

RPA 忽略了电子之间的交换-关联 (exchange-correlation) 效应，当交换-关联作用很强时，RPA 不再适用，必须对其作出修正。Hubbard 提出用

$$\epsilon_H(q, \omega) = 1 - \frac{V(q)\chi^0(q, \omega)}{1 + V(q)G(q)\chi^0(q, \omega)} \quad (1.2.1)$$

来代替 RPA 中的

$$\epsilon_{RPA}(q, \omega) = 1 - V(q)\chi^0(q, \omega) \quad (1.2.2)$$

其中 $G(q) = q^2/[2(q^2 + k_F^2)]$ 。引入 $G(q)$ 项的目的是为了计及电子周围交换空穴的效应（关联空穴则被忽略），这意味着当一个电子参与介电屏蔽时，它周围存在其它电子的几率变小。

4. STLS 近似 (Singwi-Tosi-Land-Sjölander approximation)

另一个对 RPA 进行修正的方法是由 Singwi 等人 [54] 提出的 STLS 近似。其中的介电函数与 Hubbard 介电函数的形式相同，但 $G(q)$ 的取法不同。STLS 不仅计及了交换空穴，还包含了电子周围关联空穴的效应。在 STLS 方法中，为了找出对局域场的修正，只要定出诱导电荷密度 n_{ind} 与交换-关联势 V_{xc} 之间的关系 $[V_{xc}(q, \omega) = -V(q)G(q, \omega)n_{ind}(q, \omega)]$ 即可，但其中的 $G(q)$ 只有当知道静态结构因子 $S(q)$ 时才能求出，而要获得 $S(q)$ 又需要知道 $\epsilon(q, \omega)$ ，但 $\epsilon(q, \omega)$ 又是依赖于 $G(q)$ 的。因而 $S(q)$ 、 $G(q)$ 和 $\epsilon(q, \omega)$ 的表达式组成一个三元方程组，必须自洽求解。 $G_{STLS}(q)$ 能正确描述大 q 极限时 $S(q)$ 的行为以及当电子之间距离很小时 $g(r)$ 的行为。

5. 图解微扰理论 (diagrammatic perturbation theory)

当偏离长波极限时，计算多体效应的微观方法有两种：DPT 方法 [55] 和运动方程方法 [56]。它们都能够计算任意精度的介电函数，已经被广泛应用于电子液体问题的研究中。图解方法在对相互作用进行微扰处理时意义很明确，但即使在最简单的近似下也需要求出无限个图之和，当超出 RPA 时，有关图的选择和计算都会遇到很大的困难。图解方法的优点是能够根据简单的拓扑学的考虑对图进行求和。需要注意的是多体微扰理论的图解方法中用的是表因格林函数 (causal Green function) 而不是推迟格林函数 (retarded Green function)。

6. 运动方程方法 (equation of motion method)

基于双时格林函数 (double-time Green function) 运动方程求解的 EMM 方法 [56] 是多体理论最有效的方法之一。在这种方法中，相互作用的高阶项不需要对“隐含的”频率进行积分，需要知道的是如何在二次量子化表象中计算场算符的对易子。另外，利用这种方法对 $\epsilon(q, \omega)$ 进行各种近似时，不是通过通常的繁杂计算完成的，过程更简洁明了。这种方法在实际应用中的重要性在于在计算的某一阶段可引入一个额外的近似方程，基于物理上的考虑，该方程将最高阶的格林函数与低阶的格林函数联系起来。这样，方程的数目可取为有限的，求解不会遇到严重的困难。

7. 密度泛函理论 (density function theory)

由 Hohenberg、Kohn 和 Sham 引入的密度泛函理论 [57-59] 是研究电子结构的一种新方法。DFT 用电子密度 $n(\mathbf{r})$ 而不是多电子波函数 $\Psi(\mathbf{r})$ 来描述系统的性质，交换-关联效应通过附加的交换-关联势能项包含在 Kohn-Shan 自洽方程里

面。该理论已被广泛用来计算系统的电子密度、基态能、弹性系数、功函数、表面能、声子色散关系、等离激元色散关系和磁矩等。

1.2.2. 理论研究的主要结果

多量子阱和量子阱超晶格中的等离激元和磁等离激元理论方面的研究主要是在 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 系统中进行的。等离激元振荡或介电屏蔽方面早期的工作主要是针对层状电子气体 (LEG), 利用的是自洽场 [60] 或无规相近似。Kobayashi 等人 [61] 首次在 RPA 下研究了磁等离激元, 用半经典理论研究了回旋波。八十年代以后, 真实超晶格系统中等离激元和磁等离激元方面的理论取得了很大的进展。Das Sarma 与 Quinn 的一篇内容丰富的文章 [62] 和 Bloss 与 Brody [63] 以及 Bloss [64] 的系列性的短文章激发了这些系统中大量的理论研究工作。在他们的文章中, Das Sarma 和 Quinn [62] 在 RPA 理论框架和流体动力学模型下, 研究了有限多和无限多平行的周期排列的 2DEG 中电子带内的等离激元模。他们假设每一层都是严格的二维结构 (无厚度), 考虑了第一类和第二类超晶格系统以及不存在和存在垂直磁场的情形, 发现在弱耦合 ($qd \gg 1$) 和强耦合 ($qd \ll 1$) 情形下 (q 和 d 分别是平面内的波数和超晶格的周期), 集体激发模分别趋向于二维和三维极限。后来的进展包括提出成熟的微观和宏观理论模型以及应用这些理论对各种情况下超晶格中的等离激元和磁等离激元进行研究。

根据自洽的 Hartree-Fock 近似, Ando 和 Mori [65] 研究了重掺杂的 n 型 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 超晶格中电子的子带结构, 考虑了由于电荷从势垒层向势阱层转移而引起的带弯曲效应 (band bending effects)。Quinn 等人 [66, 67] 研究了第一类和第二类超晶格中的表面等离激元以及第一类超晶格中各种二维和三维的等离激元和磁等离激元 [68]。Tsallis 等人 [69-71] 考虑了二维电子气的有限宽度, 用 SCF 方法和线性响应理论 (linear response theory) 在平带模型 (flat miniband model, 即不考虑不同层中电子波函数的交迭, 而用无限深势阱的波函数来代替) 下研究了子带内和子带间的集体激发, 并用与频率有关的介电函数计算了子带间的集体激发与 LO 声子的耦合。Lassing 和 Zawadzki [72] 发展了存在垂直磁场时半导体异质结中 2DEG 的磁声子效应方面的理论。Kallin [73] 研究了理想二维电子系统 (2DES) 中的磁等离激元, 其中整数的 Landau 能级被占据, 库仑相互作用能 $e^2/\epsilon\ell_c$ 小于电子的回旋能量 $\hbar\omega_c$ 。Jain 和 Allen [74] 以及 Jain [75] 在 RPA 下计算了层状 2DEG 中体等离激元和表面等离激元的 RS 谱。Horing 等人 [76, 77] 导出了第一类和第二类超晶格中子带间等离激元的 IDF (inverse dielectric function)。King-Smith 和 Inkson [78] 将 RPA 理论进行了推广, 研究了第一类超晶格中等离激元-声子的耦合模。计入了外加磁场和电子-声子相互作用, Huang 和 Zhou [79] 应用线性响应理论研究了 HgTe-CdTe 超晶格中子带内和子带间的集体激发。Que 和 Kirczenow [80] 预测在各量子阱之间存在电子隧穿的半导体超晶格中, 电子运动沿生长轴方向的等离激元的能量随磁场的变化表现出强烈

的振荡特征。这种现象被认为可以用来测量超晶格中的载流子密度以及探测 Landau 能级的宽化和由多体效应引起的电子 g 因子的增加。Brey 等人 [81] 指出抛物型量子阱吸收简谐振子频率的远红外辐射, 与电子-电子相互作用和阱中电子的数目无关。利用 RPA 下电子的非局域响应, Yu 和 Hermanson [82] 研究了量子阱中集体的子带间 CDE 和 SDE, 发现 GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 单量子阱异质结中直接的库仑相互作用和交换-关联相互作用大小差不多。Ridley 和 Babiker [83] 简单评论了超晶格中受限的光学声子和极化子的连续模型理论。Gurevich 和 Shtengel [84] 提出了量子阱中(磁)等离激元-声子激发和极化光学声子的动态屏蔽的微观理论。在 RPA 下, Backes 等人 [85] 研究了超薄金属膜中的纵向等离激元。Golden 和 Kalman [86] 证实层间关联使超晶格中简单的 RPA 集体模的性质发生了重要的改变: RPA 声学等离激元消失, 转变成一支类光学模, $q_{||} = 0$ 的频率敏感地依赖于层间相互作用的强弱和 q_z 。Bardos 等人 [87] 在 RPA 下研究了存在静磁场时二维玻色和费密等离子体的介电响应。在 TDLDA 下, Beck [88] 提出了 LEG 中等离子体激发的自洽理论。在他的理论模型中, 离子实用均匀分布的、平行的正电荷薄层代替。在 RPA 下, Kim 和 Sohn [89] 考虑了有限的第二类超晶格系统, 主要致力于两相邻层之间的交迭效应。在电子层有两个子带被占据, 空穴只有最低子带被占据的系统中, 他们研究了体等离激元和表面等离激元的色散关系以及 RS 强度。Kushwaha 等人 [90] 导出了准 n 维 ($n = 0, 1, 2$) 系统中 IDF 的一般性的解析表达式, 对子带的占据数目没有限制。Wu [91] 用自洽方法研究了存在外加平面内磁场时 Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs 单量子阱的电子结构。他发展了一个简单的模型, 限制势能、各分立能级的能量和波函数、费米能量、各电子能级的电子密度、耗尽层的宽度等都可以根据已知材料的参数、生长及实验条件计算出来。Kim 和 Sohn [92] 也研究了有限的 HgTe-CdTe 超晶格中子带内和子带间的等离激元。Golden 等人 [93] 在准局域电荷近似 (QLCA) 理论框架下深入研究了关联超晶格中的集体等离子体模。“关联”一词指层内和层间关联对系统等离子体动力学的效应。在最近对双层系统和超晶格系统中集体激发的研究中, QLCA 方法被认为是可靠而成功的, 能够包含外加磁场效应和推迟效应。尽管他们的工作主要集中在关联的半导体超晶格方面, QLCA 模型被认为同样适用于由交替排列的薄金属层和厚绝缘层构成的金属超晶格。

宏观方法的运用是从 Yariv 等人 [94] 开始的, 他们用各种经典的局域介电函数来模拟超晶格中各半导体层的类型, 求解系统的麦克斯韦方程组。这种方法被称为转移矩阵方法。用上述宏观方法研究体等离激元和表面等离激元的第一个深入的工作是由 Camley 和 Mills 在金属-绝缘体超晶格中进行的 [95]。接着, Camley 等人 [96] 利用类似的方法研究了磁场 (Voigt 构形) 对两组分半导体超晶格的效应, 发现表面磁等离激元是单向传播的。Babiker 等人 [97] 发展了线性格林函数理论来研究两组分半导体超晶格中的等离激元-极化子耦合模及其 RS 强度。Wallis 和 Quinn 考虑了推迟效应 [98] 和磁场效应, 应用标准的电磁场理论和适当的边界条件来研究两组分金

属 [99] 和半导体超晶格 [100] 中的体等离子体模和表面等离子体模。Doorzynski [51] 提出了 IRT, 几乎可以研究所有的准粒子激发 (如等离激元、声子、磁子等), 解析结果形式精巧、紧凑。Djafari-Rouhani 和 Dobrzynski [101] 用 IRT 获得了 n 层超晶格中各种集体激发的一般表达式。利用推迟的 TMM, Kushwaha [102] 研究了外加垂直磁场对两组分半导体和金属超晶格中体等离激元和表面等离激元的影响。用有效介质理论, Tilley 等人 [103] 研究了垂直和 Faraday 构形下的表面磁等离激元。在最令人感兴趣的高频色散区域, 自由空间的波长比超晶格周期 d 要大得多, 意味着 $q_{\parallel}d \ll 1$ 。考虑到这一点, Tilley 等人将 Kushwaha [104] 的一般的 TMM 结果进行泰勒展开, 准至 $q_{\parallel}^2d^2$ 项, 得到了用来计算表面等离激元色散关系的表达式。在宏观理论框架下, 理想的二维第一类和第二类超晶格也已经被研究过了。例如, Kushwaha 运用完全的推迟理论, 用狄拉克 δ -函数表示沿超晶格轴向电荷密度的分布, 考虑了不存在和存在垂直磁场的情形 [105]。随后, Kushwaha 和 Djafari-Rouhani [106] 扩展了界面响应理论 [51], 研究了 Voigt、垂直和 Faraday 构形下两组分半导体超晶格中的磁等离激元。他们也在 IRT 理论框架下研究了理想的第一类和第二类超晶格, 考虑了零磁场及磁场构形为 Voigt、垂直和 Faraday 的情形 [52]。Rudin 和 Reinecke [107] 研究了位置固定的带电杂质对二维等离激元的散射。在 Born 近似下, 他们获得了散射等离激元的能量和散射截面。

§ 1.3 本文的研究背景及主要工作

1.3.1 双量子阱中的等离激元研究

正如在 §1.1 中提到的那样, 由于在 DQW 中电子的动能受到抑制, 关联效应占主导地位, 能使多体效应凸现出来, 因而这种结构在过去的二十多年中引起了人们广泛的兴趣。最早考虑双层电子气系统中等离激元的是 Eguiluz 等人 [108], 他们研究了 MIS 系统中与反型层有关的界面激发, 认为这些激发是二维电子气体的等离激元和金属-绝缘体界面的表面等离激元之间的耦合模。Das Sarma 等人 [109] 研究了 DQW 结构中的等离激元, 理论上预测当两层电子气体之间的距离超过某一临界值时, 声学等离激元模将移出单粒子激发区而与光学等离激元模共存。Santoro 等人 [110] 研究了 DQW 结构中的声学等离激元, 发现当两层电子气体完全相同时, 声学等离激元模在任意层间距离下都存在。Gumbs 等人 [111] 考虑了两层电子气体间存在弱耦合的情形, 根据微扰理论导出了 DQW 系统中光学和声学等离激元色散关系的近似的解析表达式, 他们也发现声学等离激元的存在不受层间距离的限制。Das Sarma 等人 [112] 研究了存在隧穿耦合时双层结构中的等离激元。由于耦合效应, 反位相等离激元模 (即“声学模”) 产生了一个长波能隙, 能隙的大小在弱耦合极限时与耦合强度的平方根成正比, 在强耦合极限时与耦合强度成正比。Jain 等人 [113] 研究了不对称单量子阱和由两个不对称单量子阱组成的双阱结构中的等离激元, 发

现不对称效应导致某些模之间的耦合,使这些模在频率共振点附近相互排斥,不再相交。Wendler 等人 [114] 考虑了电子气体的有限扩展,在 Hartree 近似下自洽地计算了双抛物型量子阱的子带结构,研究了强隧穿耦合时子带内和子带间的等离子激元模,详细讨论了电子密度对等离子激元色散关系的影响。另外,他们还研究了不对称性对等离子激元的效应。为了考察多体效应的影响,Liu 等人 [41] 在 STLS 近似下研究了电子-电子和电子-空穴双层系统中的集体激发模,计算了局域场、对关联函数 (pair correlation function) 以及集体激发模的色散关系。Bolcatto 等人 [115] 在 TDLDA 下研究了对称 DQW 系统中的 CDE 和 SDE,发现在中等隧穿强度和低电子密度范围内,多体效应对集体激发模有很大的影响。

为了揭示 DQW 中电子-电子相互作用的性质,我们在 DQW 中的等离子激元方面作了一个系列性的工作,研究了波函数的扩展和交迭效应、阱间耦合效应、不对称效应以及交换-关联效应等对等离子激元色散关系的影响。

在 DQW 结构中的等离子激元方面的研究中,二维层状电子气体 (2DLG) 模型被广泛采纳 [108-112],其中每个阱中的电子波函数的绝对值用 δ 函数表示。很显然,该模型忽略了电子波函数的扩展和交迭效应。为了探讨 2DLG 模型的适用性,我们 [116] 在 RPA 下计算了对称 DQW 结构中的等离子激元,对 2DLG 近似下的结果与包含电子波函数扩展和交迭效应时的结果进行了比较。

在以前的研究中,很多作者忽略了波函数的扩展和阱间的耦合效应,Gumbs 等人 [111] 和 Das Sarma 等人 [112] 也忽略了电子波函数的扩展,但考虑了阱间的隧穿耦合效应,假设基态和第一激发态之间有能量差并用该能量差来表示隧穿耦合的大小。Wendler 等人 [114] 在 Hartree 近似下自洽地计算了实际的双抛物型量子阱的能级和波函数,但在他们的计算中,电子密度、调制掺杂区电离层的厚度等都是作为输入参数而人为给定的,不能系统地给出等离子激元对隧穿强度的依赖关系。而在实际调制掺杂的 DQW 中,首先确定的应该是掺杂能级,然后根据生长条件等来确定电子密度、掺杂区电离层的厚度等参数。考虑到这一点,我们采用一种新的自洽计算方法,详细研究了两阱间的耦合对等离子激元色散关系的影响 [117]。

DQW 中等离子激元方面的研究主要是在对称系统中进行的,不对称效应很少被涉及到。Jain 等人 [113] 所研究的不对称单量子阱实际上可被看成是阱间势垒厚度为零的 DQW 结构。Wendler 等人也在近期的一篇文章中考虑了不对称效应,但仅限于强隧穿耦合的情形。我们 [118] 系统的研究了隧穿耦合对不对称 DQW 结构中等离子激元的影响,预测除了光学等离子激元模外,还可能存在另一支子带内的激发模。

计入交换-关联效应,我们在 TDLDA 下深入研究了不对称效应、隧穿耦合和交换-关联修正 (exchange-correlation correction) 对不对称 DQW 中等离子激元色散关系的影响 [119]。还计算了集体激发模的光谱权重,探讨了实验上观测到由不对称效应引起的带内激发模 ω_- 的可能性。

1.3.2. 量子阱超晶格中等离激元的介电函数矩阵理论

在以前的研究中，电子气体对外界的响应是用介电函数张量 (dielectric tensor) 来表示的，我们 [120] 推导了等离激元的介电函数矩阵 (dielectric matrix) 理论的一般表达式，建立起了两种理论之间的表象变换关系。根据介电函数矩阵理论，我们分别在单电子哈密顿量的本征矢空间和傅里叶空间中导出了确定量子阱超晶格中等离激元色散关系的三组方程，研究了阱间耦合效应对等离激元的影响。

在本论文余下的部分中，我们首先在第二章根据自洽场近似和线性响应理论推导等离激元介电函数张量理论的一般表达式，并将其应用到量子阱系统中，推导确定等离激元色散关系的方程。在第三章中，系统地研究了 DQW 结构中等离激元的性质，讨论了波函数的扩展和交迭效应、阱间耦合效应、不对称效应以及交换-关联效应对等离激元色散关系的影响。在第四章中，我们推导等离激元介电函数矩阵理论的一般表达式，建立新理论与介电函数张量理论的表象变换关系；将介电函数的矩阵理论应用到量子阱超晶格中，研究阱间耦合对等离激元的影响。

第二章 量子阱系统中等离子激元的理论推导

本章我们在单电子哈密顿量的本征矢空间中推导等离子激元介电函数张量理论的一般表达式, 并将其应用到量子阱系统中, 推导确定量子阱系统中等离子激元的方程。还讨论了计入交换-关联效应时的情形。

§ 2.1 介电函数张量理论的一般表达式

我们用 Ehrenreich 和 Cohen [60] 的 SCF 方法来研究电子气系统对外界微扰的响应。假设在原点处引入一个试探电荷, 它在 $\mathbf{r}$ 处产生的势场为 $V^{ex}(\mathbf{r})$ 。在这个势场的作用下, 电子气的密度起伏 $\delta n(\mathbf{r})$ 产生的诱导屏蔽势能为 $V^{in}(\mathbf{r})$, 因此外界微扰引起的总势能为

$$V(\mathbf{r}) = V^{ex}(\mathbf{r}) + V^{in}(\mathbf{r}) \quad (2.1.1)$$

微扰下的单电子的哈密顿量可写为 $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r})$, 其中 $\hat{H}_0$ 为无外界微扰时单电子的哈密顿量, 它满足

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_0(\mathbf{r}) \quad (2.1.2)$$

其中 m^* 为电子的有效质量, $V_0(\mathbf{r})$ 为限制势。设 $\hat{H}_0$ 的本征值和本征态分别为 E_α 和 φ_α (简记为 $|\alpha\rangle$), 即满足 $\hat{H}_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$, 其中 α 表示一组量子数的集合。

假设微扰下的单电子的密度矩阵算符 $\hat{\rho}$ 和电子密度 $n(\mathbf{r})$ 可以写为

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \hat{\rho}_0 + \hat{\rho}_1 \\ n(\mathbf{r}) &= n_0 + \delta n(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

其中 $\hat{\rho}_0$ 是无微扰时的密度矩阵算符, $\hat{\rho}_1$ 是微扰引起的密度矩阵算符, $\delta n(\mathbf{r})$ 为电子的密度起伏。

为了得到由于试探电荷的引入而导致的电子密度的起伏 $\delta n(\mathbf{r})$, 我们考虑单电子的 Liouvill 方程 [121]

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (2.1.4)$$

在上式中取一阶近似即忽略式子右边 $V(\mathbf{r})\hat{\rho}_1$ 的项, 并考虑到

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial t} = [\hat{H}_0, \hat{\rho}_0] \quad (2.1.5)$$

可得

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_1}{\partial t} = [\hat{H}_0, \hat{\rho}_1] + [V(\mathbf{r}), \hat{\rho}_0] \quad (2.1.6)$$

因此有

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha | \hat{\rho}_1 | \beta \rangle &= \langle \alpha | [\hat{H}_0, \hat{\rho}_1] | \beta \rangle + \langle \alpha | [V(\mathbf{r}), \hat{\rho}_0] | \beta \rangle \\ &= (E_\alpha - E_\beta) \langle \alpha | \hat{\rho}_1 | \beta \rangle + (f_\beta - f_\alpha) \langle \alpha | V(\mathbf{r}) | \beta \rangle \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

其中 f_α 为电子的 Fermi 分布函数。根据线性响应理论 [122] 有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha | \hat{\rho}_1 | \beta \rangle = (\hbar\omega + i\eta) \langle \alpha | \hat{\rho}_1 | \beta \rangle \quad (2.1.8)$$

其中 $\eta \rightarrow 0^+$ 。由上面两式可得

$$\langle \alpha | \hat{\rho}_1 | \beta \rangle = \frac{f_\beta - f_\alpha}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\beta - E_\alpha} \langle \alpha | V(\mathbf{r}) | \beta \rangle \quad (2.1.9)$$

根据量子统计物理的理论，电子的密度起伏可以用微扰引起的密度矩阵算符表示为

$$\begin{aligned} \delta n(\mathbf{r}) &= \text{Tr} \{ \delta(\hat{\mathbf{r}}_e - \mathbf{r}) \hat{\rho}_1 \} \\ &= \sum_{\alpha} \langle \alpha | \delta(\hat{\mathbf{r}}_e - \mathbf{r}) \hat{\rho}_1 | \alpha \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \delta(\hat{\mathbf{r}}_e - \mathbf{r}) | \beta \rangle \langle \beta | \hat{\rho}_1 | \alpha \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\beta}(\mathbf{r}) \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} \langle \beta | V(\mathbf{r}) | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

其中 $\hat{\mathbf{r}}_e$ 是位置算符。记

$$\begin{aligned} V_{\beta\alpha} &= \langle \beta | V(\mathbf{r}) | \alpha \rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

则 (2.1.10) 式变为

$$\delta n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\beta}(\mathbf{r}) \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} V_{\beta\alpha} \quad (2.1.12)$$

设分别位于 $\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{r}'$ 处的两个电子之间的库仑相互作用势能为 $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ，则电子密度起伏在 $\mathbf{r}$ 处引起的感应势能为

$$\begin{aligned} V^{in}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta n(\mathbf{r}') \\ &= \sum_{\mu\nu} \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\nu}(\mathbf{r}') \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} V_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

于是

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{in} &= \langle \alpha | V^{in}(\mathbf{r}) | \beta \rangle \\ &= \sum_{\mu\nu} U_{\alpha\beta,\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} V_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

其中

$$U_{\alpha\beta,\mu\nu} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_\mu^*(\mathbf{r}') \varphi_\nu(\mathbf{r}') \quad (2.1.15)$$

由 (2.1.1) 式得

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{ex} &= V_{\alpha\beta} - V_{\alpha\beta}^{in} \\ &= \sum_{\mu\nu} \left(\delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} - U_{\alpha\beta,\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \right) V_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (2.1.16)$$

引入 $\hat{H}_0$ 本征矢空间中的介电函数张量

$$\varepsilon_{\alpha\beta,\mu\nu} = \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} - U_{\alpha\beta,\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \quad (2.1.17)$$

则 (2.1.16) 式可写为

$$V_{\alpha\beta}^{ex} = \sum_{\mu\nu} \varepsilon_{\alpha\beta,\mu\nu} V_{\nu\mu} \quad (2.1.18)$$

根据介电函数理论, 系统的集体激发由介电函数张量的行列式的零点, 即由方程

$$\left| \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} - U_{\alpha\beta,\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \right| = 0 \quad (2.1.19)$$

给出。(2.1.19) 式是我们研究电子气中等离激元色散关系的基本方程。

§ 2.2 量子阱系统中等离激元的介电函数张量理论

设量子阱沿 z 方向生长, z 方向的有效限制势为 $V(z)$, 即无微扰时单电子的哈密顿量为

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) \quad (2.2.1)$$

在有效质量理论的框架下, 电子的运动满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (2.2.2)$$

在平行于界面的 x - y 平面内, 电子的运动是自由的, 因此电子的总的波函数 $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$ 与能量 E_α 可写为

$$\begin{aligned} \varphi_\alpha(\mathbf{r}) &= |\alpha\rangle = |l, \mathbf{k}\rangle = \psi_l(z) e^{i\mathbf{k} \cdot \rho} \\ E_\alpha &= E_l(\mathbf{k}) = E_l + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

其中 $\mathbf{k}$ 与 ρ 分别为 x - y 平面内的波矢和坐标, $\mathbf{r} = (\rho, z)$ 为三维坐标。电子在 z 方向运动的波函数 $\psi_l(z)$ 和能量 E_l 满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \psi_l(z) = E_l \psi_l(z) \quad (2.2.4)$$

考虑到量子阱中波函数的形式, 我们取

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= |l, \mathbf{q}\rangle = \psi_l(z) e^{i\mathbf{q}\cdot\rho} \\ |\beta\rangle &= |l', \mathbf{q}'\rangle = \psi_{l'}(z) e^{i\mathbf{q}'\cdot\rho} \\ |\mu\rangle &= |n, \mathbf{k}\rangle = \psi_n(z) e^{i\mathbf{k}\cdot\rho} \\ |\nu\rangle &= |n', \mathbf{k}'\rangle = \psi_{n'}(z) e^{i\mathbf{k}'\cdot\rho} \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

则

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{in} &= \int d\rho dz \psi_l^*(z) e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\rho} V^{in}(\rho, z) \psi_{l'}(z) \\ &= \int dz \psi_l^*(z) V^{in}(\mathbf{q}-\mathbf{q}', z) \psi_{l'}(z) \\ &\stackrel{\text{记为}}{=} V_{ll'}^{in}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

其中

$$V^{in}(\mathbf{q}-\mathbf{q}', z) = \int d\rho e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\rho} V(\rho, z) \quad (2.2.7)$$

为 $V^{in}(\mathbf{r})$ 在平面内的 Fourier 变换。类似地可以得到

$$V_{\nu\mu} = V_{n'n}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (2.2.8)$$

将 $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 在平面内进行 Fourier 展开

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{q}''} U(\mathbf{q}'', z, z') e^{i\mathbf{q}''\cdot(\rho-\rho')} \quad (2.2.9)$$

并将其应用到 (2.1.15) 中, 得

$$\begin{aligned} U_{\alpha\beta, \mu\nu} &= \sum_{\mathbf{q}''} \delta_{\mathbf{q}-\mathbf{q}', \mathbf{q}''} \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}, \mathbf{q}''} U_{ll', nn'}(\mathbf{q}'') \\ &= \delta_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'+\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{ll', nn'}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

其中

$$U_{ll', nn'}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') = \int dz dz' \psi_l^*(z) \psi_{l'}(z) U(\mathbf{q}-\mathbf{q}', z, z') \psi_n^*(z') \psi_{n'}(z'). \quad (2.2.11)$$

根据以上各式, 在量子阱系统中 (2.1.14) 式变为

$$\begin{aligned} V_{ll'}^{in}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') &= \sum_{nn'} U_{ll',nn'}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') V_{n'n}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \\ &\times \sum_k \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{q} - \mathbf{q}' + \mathbf{k})}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{q} - \mathbf{q}' + \mathbf{k})} \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

用 $\mathbf{q}$ 代替上式中的 $\mathbf{q} - \mathbf{q}'$ 并计入电子的自旋简并得

$$V_{ll'}^{in}(\mathbf{q}) = 2 \sum_{nn'} U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) \sum_k \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} V_{n'n}(\mathbf{q}) \quad (2.2.13)$$

引入

$$\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) = 2 \sum_k \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (2.2.14)$$

上式变为

$$V_{ll'}^{in}(\mathbf{q}) = \sum_{nn'} U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) V_{n'n}(\mathbf{q}) \quad (2.2.15)$$

由此可得

$$\begin{aligned} V_{ll'}^{ex}(\mathbf{q}) &= V_{ll'}(\mathbf{q}) - V_{ll'}^{in}(\mathbf{q}) \\ &= \sum_{nn'} [\delta_{ln'} \delta_{l'n} - U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega)] V_{n'n}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

所以量子阱系统的介电函数张量为

$$\varepsilon_{ll',nn'}(\mathbf{q}, \omega) = \delta_{ln'} \delta_{l'n} - U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.2.17)$$

§ 2.3 交换-关联效应

如果考虑交换-关联效应, 则除了计入由电荷密度起伏所引起的 Hartree 诱导势 $V^{in}(\mathbf{r})$ 外, 还应计入由电荷密度起伏所引起的交换-关联势, 根据局域密度泛函近似, 诱导的交换-关联势可写为 [9]

$$\begin{aligned} \delta V^{xc}[n(\mathbf{r})] &= \frac{\partial V^{xc}[n(\mathbf{r})]}{\partial n(\mathbf{r})} \delta n(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\partial V^{xc}[n(\mathbf{r})]}{\partial n(\mathbf{r})} \sum_{\mu\nu} \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} V_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

因而

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{xc} &= \int d\mathbf{r} \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \delta V^{xc}[n(\mathbf{r})] \varphi_{\beta}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mu\nu} V_{\alpha\beta,\mu\nu}^{xc} \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} V_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

其中

$$V_{\alpha\beta,\mu\nu}^{xc} = \int d\mathbf{r} \varphi_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \varphi_{\beta}(\mathbf{r}) \frac{\partial V^{xc}[n(\mathbf{r})]}{\partial n(\mathbf{r})} \varphi_{\mu}^{*}(\mathbf{r}) \varphi_{\nu}(\mathbf{r}) \quad (2.3.3)$$

所以

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{ex} &= V_{\alpha\beta} - V_{\alpha\beta}^{in} - V_{\alpha\beta}^{xc} \\ &= V_{\alpha\beta} - \sum_{\mu\nu} (U_{\alpha\beta,\mu\nu} + V_{\alpha\beta,\mu\nu}^{xc}) \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} V_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

可得介电函数张量为

$$\varepsilon_{\alpha\beta,\mu\nu} = \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} - (U_{\alpha\beta,\mu\nu} + V_{\alpha\beta,\mu\nu}^{xc}) \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} \quad (2.3.5)$$

对于量子阱的情形

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta,\mu\nu}^{xc} &= \int d\rho e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}'+\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\rho} \int dz \varphi_i^{*}(z) \varphi_{i'}(z) \frac{\partial V^{xc}[n(z)]}{\partial n(z)} \varphi_n^{*}(z) \varphi_{n'}(z) \\ &= V_{ll',nn'}^{xc} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

其中

$$V_{ll',nn'}^{xc} = \int dz \varphi_l^{*}(z) \varphi_{l'}(z) \frac{\partial V^{xc}[n(z)]}{\partial n(z)} \varphi_n^{*}(z) \varphi_{n'}(z) \quad (2.3.7)$$

方程 (2.3.2) 变为

$$\begin{aligned} V_{ll'}^{xc}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') &= \sum_{nn'} V_{ll',nn'}^{xc} V_{n'n}(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \\ &\times \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}')}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}')} \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

用 $\mathbf{q}$ 代替上式中的 $\mathbf{q}-\mathbf{q}'$ 并计入电子的自旋简并得

$$V_{ll'}^{xc}(\mathbf{q}) = \sum_{nn'} V_{ll',nn'}^{xc} \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) V_{n'n}(\mathbf{q}) \quad (2.3.9)$$

所以

$$\begin{aligned} V_{ll'}^{ex}(\mathbf{q}) &= V_{ll'}(\mathbf{q}) - V_{ll'}^{in}(\mathbf{q}) - V_{ll'}^{xc}(\mathbf{q}) \\ &= \left\{ \delta_{ln'} \delta_{l'n} - [U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) + V_{ll',nn'}^{xc}] \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \right\} V_{n'n}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

由此得介电函数张量为

$$\varepsilon_{ll',nn'}(\mathbf{q}, \omega) = \delta_{ln'} \delta_{l'n} - [U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) + V_{ll',nn'}^{xc}] \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.3.11)$$

第三章 双量子阱中的等离激元研究

在本章中, 我们研究波函数的扩展和交迭效应、阱间耦合效应、不对称效应以及交换-关联效应对 DQW 结构中等离激元色散关系的影响。

§ 3.1 波函数的扩展和交迭效应对对称双量子阱中等离激元的影响

3.1.1. 引言

在过去的二十年中, DQW 结构中集体的电荷密度激发(等离激元)引起了人们实验上 [38, 39, 45, 123] 和理论上 [37, 40, 41, 109-112, 114, 115, 124] 广泛的研究兴趣, 这主要是因为电子气体的激发谱能深入揭示电子之间的相互作用机制, 而在 DQW 结构中, 两层电子气体之间的库仑相互作用使电子的动能受到抑制, 多体效应占主导地位。例如, 许多在低电子浓度下与交换-关联效应有关的多体现象 [40, 41, 45, 115] 以及双层结构中的库仑牵引 (Coulomb drag) 效应 [37, 38] 已经在理论上预言并在实验中观察到了。

在 DQW 结构中等离激元方面的研究中, 二维层状电子气体 (2DLG) 模型被广泛采纳, 其中每个阱中的电子波函数的绝对值用 δ 函数表示。很显然, 该模型忽略了波函数的扩展和交迭效应。在零隧穿情形下, 理论上预言双层结构中存在一支声学等离激元模 [109, 110], 这支模已经在 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 双层结构中用非弹性光散射实验观测到了 [45]。最近, 隧穿效应对 DQW 结构中等离激元的影响引起了人们越来越多的注意 [111, 112, 114]。在弱耦合情形下, 理论预言声学等离激元有一个长波能隙 [112]。在本节中, 我们研究波函数的扩展和交迭效应对对称 DQW 中等离激元的影响, 讨论 2DLG 模型的适用性。等离激元谱是在自洽场理论 [60] 和线性响应理论 [122] 的框架下根据无规相近似得到的。

3.1.2. 公式

在 DQW 结构中, 电子在平行于异质界面的平面内的运动是自由的, 但在垂直于异质界面方向上的运动是受限的, 电子的能谱由若干分立的子带组成。选择垂直于异质界面的方向为 z 方向, 量子阱系统的波函数可写为 $|\alpha\rangle = |l, \mathbf{k}\rangle = \varphi_l(z)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_\parallel}$,

其中 $\mathbf{r}_{\parallel}$ 和 $\mathbf{k}$ 分别为 x - y 平面内的二维位置矢量和二维波矢, l 是子带指标。 $|\alpha\rangle$ 态的能量为 $E_l(\mathbf{k}) = E_l + \hbar^2 k^2 / 2m_0^*$, 其中 $k = |\mathbf{k}|$, E_l 为第 l 个能级的能量, m_0^* 为阱层材料中电子的有效质量。根据自洽场理论和线性响应理论, 动态介电函数可写为

$$\epsilon_{ll',nn'}(\mathbf{q}, \omega) = \delta_{ln'} \delta_{l'n} - U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.1.1)$$

其中

$$U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) = \iint \varphi_l^*(z) \varphi_{l'}(z) U(\mathbf{q}, z, z') \varphi_n^*(z') \varphi_{n'}(z') dz dz' \quad (3.1.2)$$

$$\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar(\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (3.1.3)$$

(3.1.2) 式中 $U(\mathbf{q}, z, z')$ 的定义为

$$U(\mathbf{q}, z, z') = \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 q} e^{-q|z-z'|} \quad (3.1.4)$$

其中 $q = |\mathbf{q}|$, ϵ_0 为真空介电常数, ϵ_r 为半导体材料的相对介电常数。(3.1.3) 式中的 $f_n(\mathbf{k})$ 和 $f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ 分别为态 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 和 $|n', \mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle$ 被电子占据的几率, η 是一个正无穷小量 (即 $\eta \rightarrow 0^+$)。集体激发模由 (3.1.1) 式中介电函数张量的行列式的零点决定, 即由方程

$$\det [\delta_{ln'} \delta_{l'n} - U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega)] = 0 \quad (3.1.5)$$

给出。

应用 2DLG 近似, 将量子阱间的隧穿作微扰处理, 可把基态和第一激发态的波函数近似为

$$\begin{aligned} \varphi_+(z) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\delta(z - \frac{b}{2} - \frac{w}{2}) + \delta(z + \frac{b}{2} + \frac{w}{2}) \right] \\ \varphi_-(z) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\delta(z - \frac{b}{2} - \frac{w}{2}) - \delta(z + \frac{b}{2} + \frac{w}{2}) \right] \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

其中 w 和 b 分别为阱层和两阱之间的垒层的厚度。作以上近似后, (3.1.5) 式可分解为两个方程 [112]

$$\begin{aligned} V_+(\mathbf{q}) [\Pi_{11}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_{22}(\mathbf{q}, \omega)] &= 1 \\ V_-(\mathbf{q}) [\Pi_{21}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_{12}(\mathbf{q}, \omega)] &= 1 \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

它们分别描述双层结构中的对称模和反对称模。(3.1.7) 式中 $V_{\pm}(\mathbf{q})$ 的定义为

$$V_{\pm}(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{4\epsilon_r \epsilon_0 q} [1 \pm e^{-q(w+b)}] \quad (3.1.8)$$

ω - q 平面内极化函数的虚部满足 $\text{Im}\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$ 的区域为单粒子激发区。 $(n-n')$ 单粒子激发区为 [114]

$$\begin{cases} \left| \hbar\omega + E_n - E_{n'} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0^*} \right| < \frac{\hbar^2 q}{m_0^*} k_F^{(n)} \\ \left| \hbar\omega + E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0^*} \right| < \frac{\hbar^2 q}{m_0^*} k_F^{(n')} \end{cases} \quad (3.1.9)$$

其中 $k_F^{(n)}$ 和 $k_F^{(n')}$ 分别为子带 n 和 n' 的 Fermi 波矢。在单粒子激发区内，等离激元模是 Landau 阻尼的，自发地退化为单粒子激发。

为了揭示波函数的扩展和交迭效应，我们分别根据 (3.1.5) 式和 (3.1.7) 式计算了 DQW 结构中的等离激元谱，并对两者进行了比较。

3.1.3. 数值结果和讨论

在计算中，取阱层 (GaAs) 和垒层 ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) 中电子的有效质量分别为 $m_w = m_0^*$ 和 $m_b = m_0^* + 0.083m_e x$ ，其中 $m_0^* = 0.067m_e$ ， m_e 是裸电子的质量， x 为垒层中铝的含量。设限制势在阱层满足 $V_0(z) = 0$ ，在垒层满足 $V_0(z) = 0.75x \text{ eV}$ ($0 \leq x \leq 0.45$)，或 $V_0(z) = 0.75x + 0.69(x - 0.45)^2 \text{ eV}$ ($0.45 < x < 1$) [125]。在计算中取 $x = 0.3$ ，二维电子密度 $n_{2\text{DEG}} = 5.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。

图 3.1.1 为 $b = 10.0 \text{ nm}$ 和 2.0 nm 时 $w = 10.0 \text{ nm}$ 的 DQW 结构中的等离激元谱，实线和虚线分别是根据 (3.1.5) 式和 (3.1.7) 式算得的结果，阴影区域表示单粒子激发区。对于 $b = 10.0 \text{ nm}$ 的 DQW [见图 3.1.1(a)]，两阱间的波函数不存在交迭，因而阱间隧穿可以忽略。在这种零隧穿的情形下，对称和反对称态是简并的。图 3.1.1(a) 中标记为 ω_+ (ω_-) 的模是光学（声学）等离激元模，对应于两阱间电子密度的同位相（反位相）振荡。当 q 较小时，2DLG 模型的结果（虚线）与包含波函数扩展时的结果（实线）符合得很好，但当 q 较大时，近似值稍微偏离了准确值。当 b 小到 2.0 nm 时 [见图 3.1.1(b)]，两阱间的隧穿变得很强，对称态和反对称态的简并消除，使得两个单粒子激发区分离开来， ω_- 由原来的声学模演变为一支具有长波能隙的带间模。当 q 达到某一临界值时， ω_+ 进入 $(1-0)$ 单粒子激发区而被阻尼掉。从图 3.1.1(b) 可以看出，2DLG 模型下 ω_+ 的结果与根据 (3.1.5) 式求得的准确结果一致，但 ω_- 的近似结果明显偏离准确值。

图 3.1.2 为垒层厚度分别为 $b = 20.0 \text{ nm}$ 和 1.0 nm 时 $w = 30.0 \text{ nm}$ 的 DQW 结构中等离激元的色散关系。从图 3.1.2(a) 可以看出， $b = 20.0 \text{ nm}$ 的结果的基本特征与图 3.1.1(a) 很类似，但当 q 较大时，近似结果与准确结果之间的差别比图 3.1.1(a) 大得多。这种显著的差别可作如下的理解：在图 3.1.1(a) 和 3.1.2(a) 中，势垒的厚度都很大，两阱之间都不存在隧穿，两者之间的区别在于图 3.1.2(a) 中阱的宽度比图 3.1.1(a) 大得多，因而波函数更扩展，所以在图 3.1.2(a) 中忽略波函数的扩展会导致

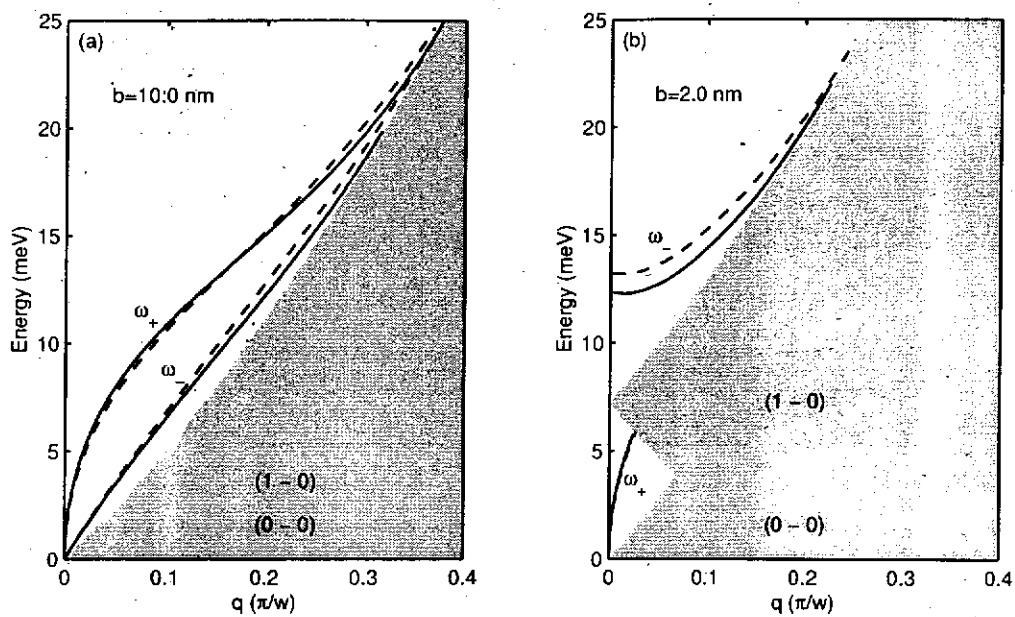


图 3.1.1 $w = 10.0$ nm 的对称 DQW 中等离激元的色散关系：(a) $b = 10.0$ nm (b) $b = 2.0$ nm。虚线和实线分别是忽略和包含波函数的扩展和交迭时的结果。阴影区域表示单粒子激发区。

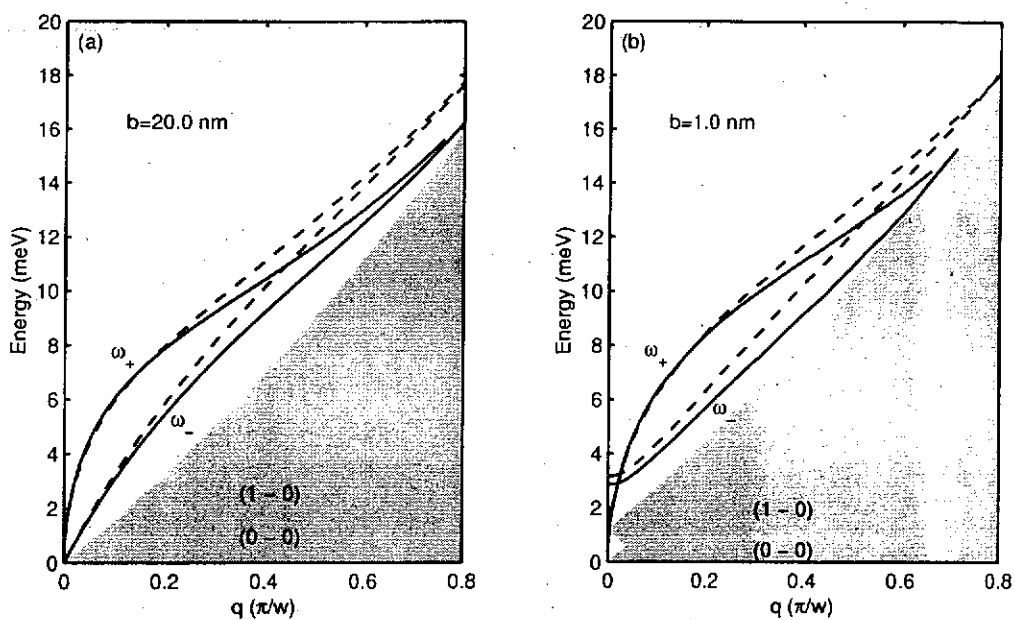


图 3.1.2 $w = 30.0$ nm 的对称 DQW 中等离激元的色散关系：(a) $b = 20.0$ nm (b) $b = 1.0$ nm。虚线和实线分别是忽略和包含波函数的扩展和交迭时的结果。阴影区域表示单粒子激发区。

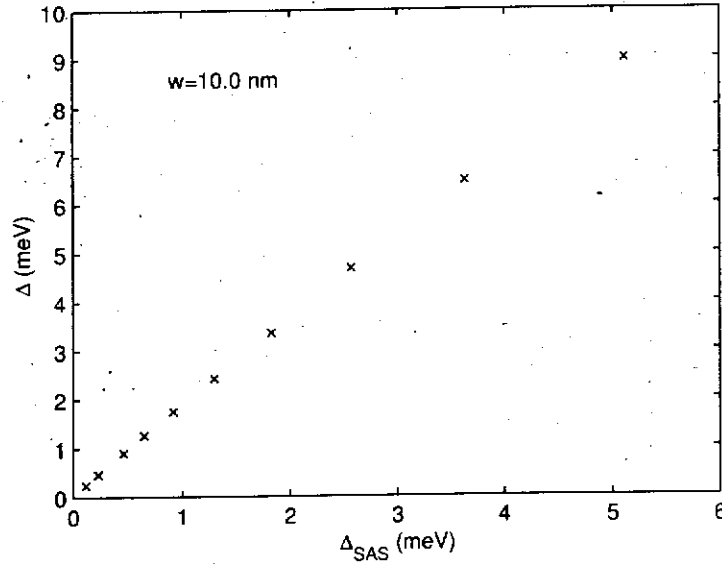


图 3.1.3 对称 DQW 结构中 ω_- 模的长波能隙随基态和第一激发态之间的能量差 Δ_{SAS} 的变化。DQW 的阱宽为 $w = 10.0$ nm，垒宽 b 的取值范围为 2.0 nm $\sim$ 10.0 nm。

比图 3.1.1(a) 更大的偏差。对于 $b = 1.0$ nm 的情形 [见图 3.1.2(b)]，需要注意以下几个特征：(i) 由于两阱间的隧穿效应， ω_- 产生了一个长波能隙 [定义为 $\Delta \equiv \omega_-(q \rightarrow 0)$] 并与 ω_+ 相交；(ii) 当 q 较小时 ω_+ 的近似结果与准确值符合得很好，但当 q 变大时会产生显著的偏差；(iii) 不论 q 取什么值， ω_- 的近似结果与准确值之间都有明显的偏差。

总之，数值结果表明，当垒比较宽时 2DLG 模型在长波限下是一个很好的近似，但当垒比较窄时，波函数的扩展和交迭不能忽略。

在文献 [112] 中，作者详细研究了 ω_- 的长波能隙，宣称当 $\Delta_{SAS}/E_F \gg q_{TF}(w+b)$ 时， ω_- 的长波能隙 $\Delta \sim \Delta_{SAS}$ ，而当 $\Delta_{SAS}/E_F \ll q_{TF}(w+b)$ 时 $\Delta \sim \sqrt{\Delta_{SAS}}$ ，其中 $\Delta_{SAS} = E_- - E_+$ 是对称和反对称态之间的能量差， $q_{TF} = m_0^* e^2 / 2\pi\epsilon_r\epsilon_0$ 是二维 Thomas-Fermi 波矢。在我们的计算中， $q_{TF}(w+b)$ 约为 1 的数量级，而 $\Delta_{SAS} \ll E_F$ ，因而 $\Delta_{SAS}/E_F \ll q_{TF}(w+b)$ 成立。但数值结果表明 Δ 正比于 Δ_{SAS} 而不是 $\sqrt{\Delta_{SAS}}$ 。作为例子，图 3.1.3 给出了 $w = 10.0$ nm 的 DQW 中 b 的取值范围为 2.0 nm $\sim$ 10.0 nm 时 ω_- 的长波能隙随 Δ_{SAS} 的变化。可以看出， Δ 正比于 Δ_{SAS} ，斜率约为 1.8。文献 [112] 所宣称的当 $\Delta_{SAS}/E_F \ll q_{TF}(w+b)$ 时 $\Delta \sim \sqrt{\Delta_{SAS}}$ 的结论显然是错误的。

§ 3.2 阱间耦合效应对对称双量子阱中等离激元的影响

3.2.1. 引言

多年来人们对准二维电子气 (Q2DEG) 的性质作了深入的研究, 揭示了许多与电子-电子相互作用有关的现象。电子气体的激发谱能使我们深入了解电子之间的相互作用机制, 基于这种对基本相互作用过程透彻理解的需要, Q2DEG 中集体激发方面的研究引起了人们广泛的兴趣。在这些研究中, 双层结构在实验上 [38, 39, 45, 123] 和理论上 [37, 40, 41, 109-112, 114, 115, 124] 都受到了人们相当的关注, 这是因为层间的库仑相互作用使电子的动能受到抑制, 多体效应占主导地位。例如, 许多在低电子浓度下与交换-关联有关的现象 [40, 41, 45, 115] 和双层结构中的库仑牵引效应 [37, 38] 已经在理论上被预言, 并在实验上观测到了。Equiluz 等人 [124] 首次研究了双反型层结构中的等离激元。Das Sarma 等人 [109] 预言在无隧穿耦合的 DQW 中同时存在声学 and 光学等离激元模。Santoro 等人 [110] 根据异质结的物理参数分析了声学等离激元模存在的条件。这支声学模已经在无隧穿的 $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 双量子阱结构中通过非弹性光散射实验观测到了 [45]。

最近, 存在阱间隧穿的 DQW 结构中的等离激元引起了人们浓厚的兴趣。弱隧穿耦合时的等离激元已经通过微扰理论研究过了 [111, 112]。Wendler 等人 [114] 自洽地计算了强隧穿耦合情形下双抛物型量子阱中的子带内和子带间的等离激元模, 详细地研究了这些等离激元模对面电荷密度的依赖关系。受上述工作的启发, 我们在本节中研究 $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 双方型量子阱 (DSQW) 结构中的集体激发, 揭示库仑耦合和隧穿耦合情形下等离激元模在不同耦合强度下的行为。在计算能级和波函数时, 二维电子密度、掺杂的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层中耗尽层的厚度等参数是根据材料的性质、生长条件等自洽确定出来的, 而不是象以前那样把它们作为输入参数而人为地给定。

3.2.2. 公式

(一) 子带结构

DSQW 的结构如图 3.2.1 所示, 两个 GaAs 层 (宽度分别为 w_1 和 w_2) 被未掺杂的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层 (宽度为 b) 分开, 两边是两个部分掺杂的 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层, 其中未掺杂的间隔层 (spacer layer) 宽度分别为 s_1 和 s_2 , 均匀掺杂区的掺杂浓度为 N_d 。考虑到掺杂区是部分耗尽的, 假设只有图中的阴影区域内的杂质发生了电离, 耗尽层的宽度 d_1 和 d_2 在计算中是自洽确定的。在有效质量近似下, 单电子的一维 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V_{eff}(z) \right] \varphi_i(z) = E_i \varphi_i(z) \quad (3.2.1)$$

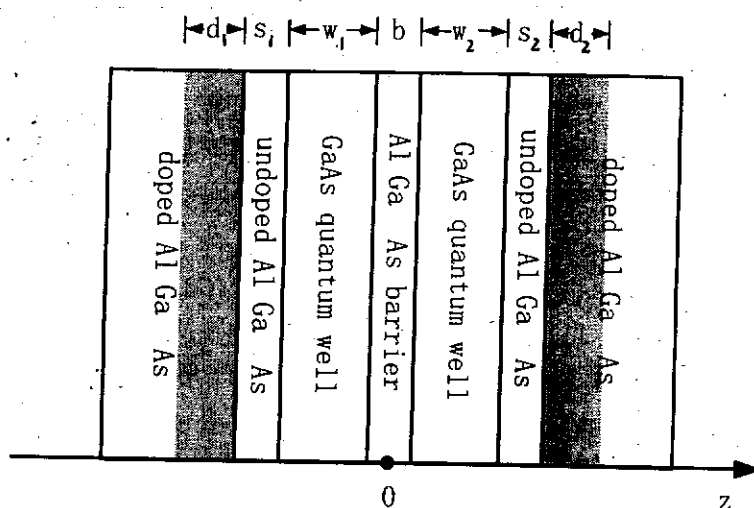


图 3.2.1 基于 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ 材料的调制掺杂的 DSQW 的结构示意图。 x 是调制掺杂层中铝的含量, $w_j (j = 1, 2)$ 是第 j 个量子阱的宽度, s_j 和 d_j 分别是第 j 个 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层中间隔层和耗尽层的宽度, N_d 是调制掺杂层中施主杂质的浓度。

其中 $V_{\text{eff}}(z) = V_0(z) + V_H(z) + V_{xc}(z)$ 是有效势, 包括裸的限制势 $V_0(z)$ (源于电子导带在界面处的不连续)、Hartree 势 $V_H(z)$ (源于运动电子和静止的离化杂质的静电势) 和交换-关联势 V_{xc} 。这里选择样品的生长方向为 z 轴方向。Hartree 势 $V_H(z)$ 满足泊松方程

$$\frac{d^2}{dz^2} V_H(z) = -\frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r} [n(z) - N_d(z)] \quad (3.2.2)$$

其中 ϵ_0 是真空介电常数, ϵ_r 是半导体材料的相对介电常数, $N_d(z)$ 是掺杂浓度。本文忽略了 GaAs 和 AlGaAs 介电常数的差别。 z 方向电子浓度的分布为

$$n(z) = \sum_i |\varphi_i(z)|^2 n_i \quad (3.2.3)$$

其中第 i 个子带的电子面密度为

$$n_i = \frac{m_0^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i) \Theta(E_F - E_i) \quad (3.2.4)$$

在 (3.2.4) 式中, m_0^* 是 GaAs 材料中电子的有效质量, $\Theta(x)$ 是 Heaviside 单位阶跃函数。根据文献 [126], 在低温极限下 ($T \rightarrow 0$), 费米能量 E_F 可取为施主能级, 可设它位于 GaAs 层导带底以上 E_d 能量处。利用局域密度泛函近似下参数化的解析表达式, 交换-关联势可写为 [127]

$$V_{xc} = -0.985 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} n^{1/3}(z) \left\{ 1 + \frac{0.034}{a_B^* n^{1/3}(z)} \ln [1 + 18.376 a_B^* n^{1/3}(z)] \right\} \quad (3.2.5)$$

其中有效玻尔半径 $a_B^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r \hbar^2 / m_0^* e^2$ 。

Schrödinger 方程和泊松方程可利用迭代方法进行自洽求解。在 Numerov 算法中应用“转折点”匹配方法 [128, 129], Schrödinger 方程可根据边界条件 $\varphi_i(\pm\infty) = 0$

求解。根据求得的本征波函数 $\varphi_i(z)$ 和本征值 E_i ，可求出总的电荷密度 n_T （定义为 $n_T = \sum_i n_i$ ）、 z 方向的电子密度 $n(z)$ 、耗尽层的厚度 d_1 和 d_2 、Hartree 势 $V_H(z)$ 以及交换-关联势 $V_{xc}(z)$ 等。利用这些函数和参量，可再次求解 Schrödinger 方程，获得新的解。将这个迭代过程一直持续下去，直到满足收敛条件。

(二) 密度响应

下面在自洽场理论 [60] 和线性响应理论 [122] 的框架下导出 Q2DEG 的密度响应。设单电子的哈密顿量为 $\hat{H} = \hat{H}_0 + V^{sc}(\mathbf{r}, t)$ ，其中 $\hat{H}_0$ 是无微扰的单电子哈密顿量， $V^{sc}(\mathbf{r}, t)$ 是自洽势，它是外加微扰势 $V^{ex}(\mathbf{r}, t)$ 和微扰诱导产生的势 $V^{in}(\mathbf{r}, t)$ 之和。假设外加势在 $t = -\infty$ 时开始起作用，可设 $V^{ex}(\mathbf{r}, t) = V^{ex}(\mathbf{r}, \omega) \exp[-i(\omega + i\eta)t]$ ，其中 $\eta \rightarrow 0^+$ 。在自洽场近似和线性响应近似下，求解单粒子 Liouville 方程 [60]，可得

$$\langle \alpha | \hat{\rho}^{(1)} | \beta \rangle = \frac{f_\beta - f_\alpha}{\hbar(\omega + i\eta) + E_\beta - E_\alpha} \langle \alpha | V^{sc} | \beta \rangle \quad (3.2.6)$$

其中 $\hat{\rho}^{(1)}$ 是诱导的电子密度矩阵算符， f_α (f_β) 是态 $|\alpha\rangle$ ($|\beta\rangle$) 的占据几率。诱导产生的势与诱导的电子密度之间满足关系式

$$V^{in}(\mathbf{r}, t) = \int U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta n(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \quad (3.2.7)$$

其中 $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 是分别位于 $\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{r}'$ 处的两个电子之间的库仑相互作用。求态 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 的矩阵元，可得

$$\langle \alpha | V^{in} | \beta \rangle = \sum_{\mu\nu} \langle \alpha | \langle \mu | U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') | \nu \rangle | \beta \rangle \frac{f_\mu - f_\nu}{\hbar(\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \langle \nu | V^{sc} | \mu \rangle \quad (3.2.8)$$

对于准二维电子气体，电子的波函数可写为 $\Psi(\mathbf{r}) = \varphi_l(z) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\parallel}$ ，其中 $\mathbf{r}_\parallel$ 和 $\mathbf{k}$ 分别是 x - y 平面内的二维位置矢量和二维波矢， l 是子带指标。在 (3.2.8) 式中，应用 $|\alpha\rangle = |l, \mathbf{q}\rangle$ ， $|\beta\rangle = |l', \mathbf{q}'\rangle$ ， $|\mu\rangle = |n, \mathbf{k}\rangle$ 和 $|\nu\rangle = |n', \mathbf{k}'\rangle$ 并作 x - y 平面内的 Fourier 变换，得

$$V_{ll'}^{in}(\mathbf{q}'') = \sum_{nn'} U_{ll', nn'}(\mathbf{q}'') \Pi_{nn'}(\mathbf{q}'', \omega) V_{n'n}^{sc}(\mathbf{q}'') \quad (3.2.9)$$

其中 $\mathbf{q}'' = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$ 。有关的矩阵元定义如下

$$V_{ll'}^{in}(\mathbf{q}) = \int V^{in}(\mathbf{q}, z) \varphi_l^*(z) \varphi_{l'}(z) dz \quad (3.2.10)$$

$$U_{ll', nn'}(\mathbf{q}) = \iint \varphi_l^*(z) \varphi_{l'}(z) U(\mathbf{q}, z, z') \varphi_n^*(z') \varphi_{n'}(z') dz dz' \quad (3.2.11)$$

$$\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar(\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (3.2.12)$$

$V_{n'n}^{sc}(\mathbf{q})$ 的定义与 $V_{ll'}(\mathbf{q})$ 类似。(3.2.10) 式中的 $V^{in}(\mathbf{q}, z)$ 和 (3.2.11) 式中的 $U(\mathbf{q}, z, z')$ 分别是 $V^{in}(\mathbf{r})$ 和 $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 的二维 Fourier 变换。 $U(\mathbf{q}, z, z')$ 的定义为

$$U(\mathbf{q}, z, z') = \frac{e^2}{2\epsilon_r\epsilon_0 q} e^{-q|z-z'|} \quad (3.2.13)$$

其中 $q = |\mathbf{q}|$ 。需要注意的是 (3.2.12) 式中的因子“2”，它来源于电子的自旋简并。最后可导出确定集体激发模的方程为

$$\det [\delta_{ln'}\delta_{l'n} - U_{ll',nn'}(\mathbf{q})\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega)] = 0 \quad (3.2.14)$$

ω - q 平面内极化函数的虚部满足 $\text{Im}\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \neq 0$ 的区域为单粒子激发区。 $(n-n')$ 单粒子激发区为 [114]

$$\begin{cases} \left| \hbar\omega + E_n - E_{n'} - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0^*} \right| < \frac{\hbar^2 q}{m_0^*} k_F^{(n)} \\ \left| \hbar\omega + E_n - E_{n'} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_0^*} \right| < \frac{\hbar^2 q}{m_0^*} k_F^{(n')} \end{cases} \quad (3.2.15)$$

其中 $k_F^{(n)}$ 和 $k_F^{(n')}$ 分别是子带 n 和 n' 的费米波矢。在单粒子激发区内，等离激元模是 Landau 阻尼的，自发地退化为单粒子激发。

由于只有能量最低的两个子带被电子占据，在计算中可采用四子带模型 ($n, n' = 0, 1, 2, 3$)。这里我们将 l 和 l' 子带间的集体跃迁记为 $\omega_{ll'}$ 。严格地说这种记法只有当子带间的耦合 (ISC) 为零时才是正确的，此时所有的模相互独立。为方便起见，尽管存在子带间的耦合，在本节中仍采用这套记法。如果限制势是空间对称的，则等离激元模可分为两组：偶宇称模（混合的 ω_{00} 、 ω_{11} 、 ω_{20} 和 ω_{31} 等离激元支）和奇宇称模（混合的 ω_{10} 、 ω_{21} 和 ω_{30} 等离激元支）。需要指出的是，在对称的 DQW 系统中，尽管存在 ISC，但宇称相反的模之间仍是相互独立的。

3.2.3. 数值结果及分析

(一) 子带结构

在计算中取 GaAs 层的相对介电常数 $\epsilon_r = 12.87$ ，电子的有效质量 $m_0^* = 0.067m_e$ ，其中 m_e 是裸电子的质量。取 $s_1 = s_2 = 4.0 \text{ nm}$ ， $N_d = 5.0 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ， $E_d = 70 \text{ meV}$ ， $x = 0.3$ (x 是 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层中铝的含量)。对 GaAs 层，取 $V_0(z) = 0$ ， $m^*(z) = m_0^*$ ；对 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 层，取 $V_0(z) = 0.75x \text{ eV}$ (当 $0 \leq x \leq 0.45$ 时) 或 $V_0(z) = 0.75x + 0.69(x - 0.45)^2 \text{ eV}$ (当 $0.45 < x \leq 1$ 时)， $m^*(z) = m_0^* + 0.083m_ex$ [125]。两阱之间势垒层的限制势记为 V_b 。

$w_1 = w_2 = 10.0 \text{ nm}$ 、 $b = 2.5 \text{ nm}$ 及 $V_b = 225 \text{ meV}$ 的对称 DSQW 结构的有效势、四个最低子带的能量以及电子在 z 方向的密度分布如图 3.2.2 所示。由于

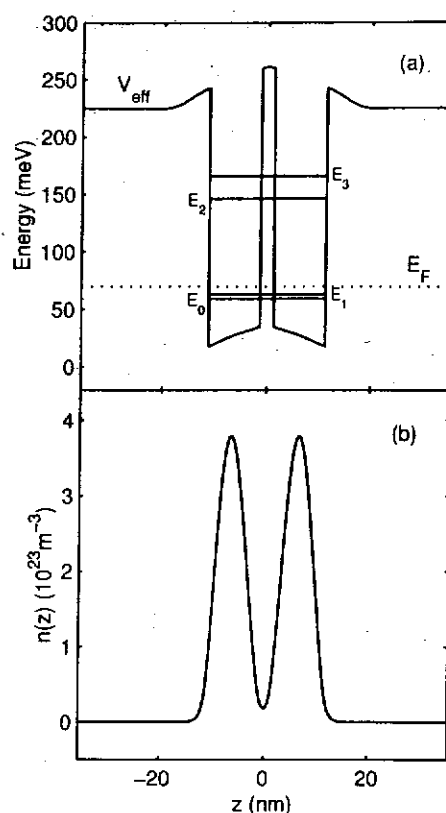


图 3.2.2 $w_1 = w_2 = 10.0 \text{ nm}$, $b = 2.5 \text{ nm}$ 和 $V_b = 225 \text{ meV}$ 的对称 DSQW 结构的 (a) 有效势 V_{eff} 与最低的四个能级的能量以及 (b) 电子在 z 方向的密度分布 $n(z)$ 。

两阱之间的隧穿效应，能级表现为成对出现的双态。 V_H 和 V_{xc} 的贡献以及系统的对称性质可以明显地看出来。图中还显示只有能量最低的两个能级被电子占据。 $w_1 = w_2 = 10.0 \text{ nm}$, $V_b = 225 \text{ meV}$ 的 DSQW 结构中 (a) 自洽计算的子带能级, (b) 总的二维电子密度, (c) 相应的裸能级和 (d) 两种情形下能量最低的两个能级之间的间距随 b 的变化如图 3.2.3 所示。对于自洽计算的子带能级 [见图 3.2.3(a)] 和电子密度 [见图 3.2.3(b)], 结果表明随 b 的增大, 双态的劈裂减小, 总的二维电子密度先迅速下降, 然后逐渐平缓, $b > 4.0 \text{ nm}$ 时趋于某一常数。比较图 3.2.3(a) 和 3.2.3(c) 可以发现, 当包含 Hartree 势和交换-关联势时, 多体重整化 (many-body renormalization) 显著提高了各子带的能量, 意味着多体效应应该使双态的劈裂增大。为了检验这一点, 我们在图 3.2.3(d) 中画出了包含和不包含 Hartree 势及交换-关联势时最低的两个能级间距随 b 的变化。很明显, 多体重整化显著改变了两个能级的劈裂。例如, 当 $b = 1.0 \text{ nm}$ 时多体效应的贡献达到了 19%。需要注意的是多体效应使双态之间的劈裂减小了, 这似乎与多体效应使子带能级提高的事实相矛盾。如果计入多体相互作用, 这个结果可作如下理解: 多体效应从两个方面影响双态的能级劈裂, 它一方面提高了子带能级, 导致两阱间的隧穿和能级劈裂增大; 同时, 两

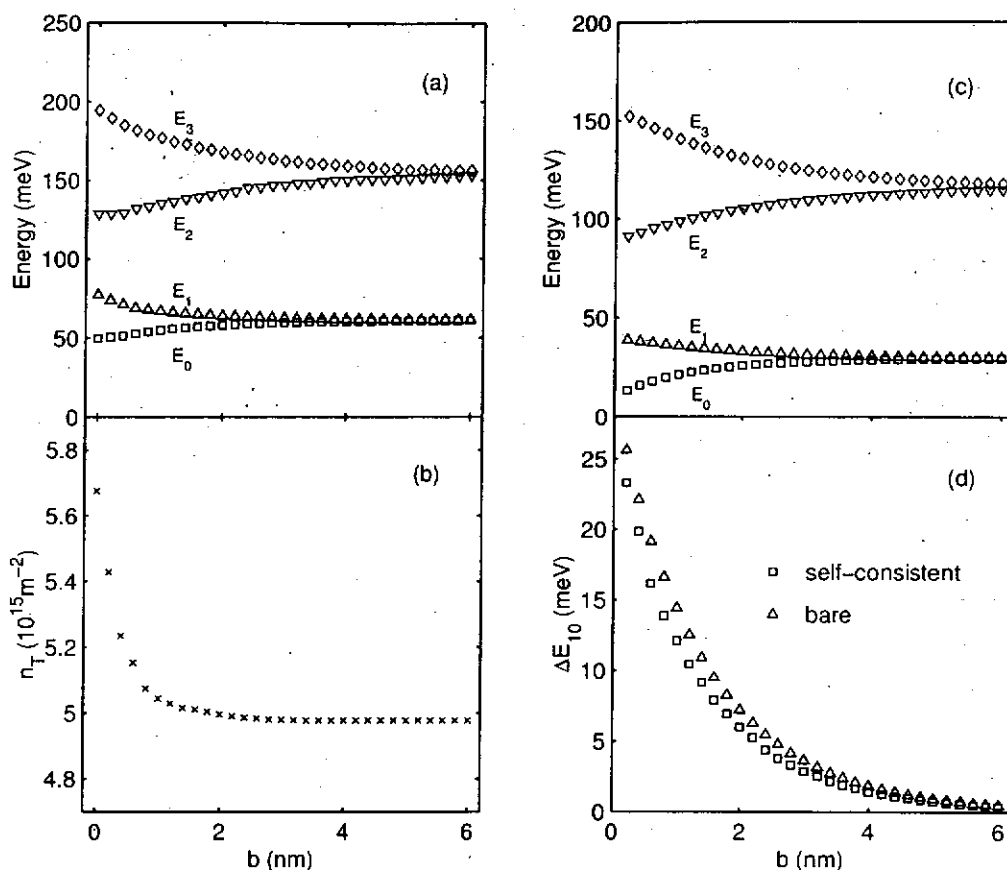


图 3.2.3 $w_1 = w_2 = 10.0 \text{ nm}$ 和 $V_b = 225 \text{ meV}$ 的对称 DSQW 中 (a) 自洽计算的子带能级, (b) 自洽计算的电子面密度 n_T , (c) 裸能级的能量和 (d) 自洽计算的和裸能级两种情形下最低的两个能级之间的间距随 b 的变化。

阱间电子之间的库仑相互作用减小了隧穿效应。双态的劈裂由这两个方面之间竞争的具体情况决定, 数值结果表明后者大于前者。从以上的讨论可以看出, 多体效应对子带能级有很大的影响。 $w_1 = 10.0 \text{ nm}$ 、 $w_2 = 10.0 \text{ nm}$ 及 $b = 3.5 \text{ nm}$ 的对称 DSQW 结构中子带能量和总的二维电子密度随垒高 V_b 的变化如图 3.2.4 所示, 其基本特征与图 3.2.3 类似。仔细比较两幅图可以发现其中的第四个能级 (E_3 能级) 有明显区别: 3.2.4 中的 E_3 能级几乎不随 V_b 的改变而变化, 并在 V_b 约为 75 meV 处趋向于其最小值; 而在图 3.2.3 中, E_3 随 b 的增加而单调地减小。我们也计算了不同垒高下多体效应对子带能级的修正, 发现改变 V_b 时多体效应对子带能级的影响与改变 b 的情形很相似。

(二) 等离激元谱

首先考虑库仑耦合情形下不同耦合强度时的等离激元, 此时势垒层的宽度足够大, 两阱间的隧穿效应可以忽略。 b 分别为 8.0 nm 、 20.0 nm 和 40.0 nm 时能量最低的两支等离激元模如图 3.2.5 所示。标记为 ω_+ 的等离激元支是“光学模”, 它相

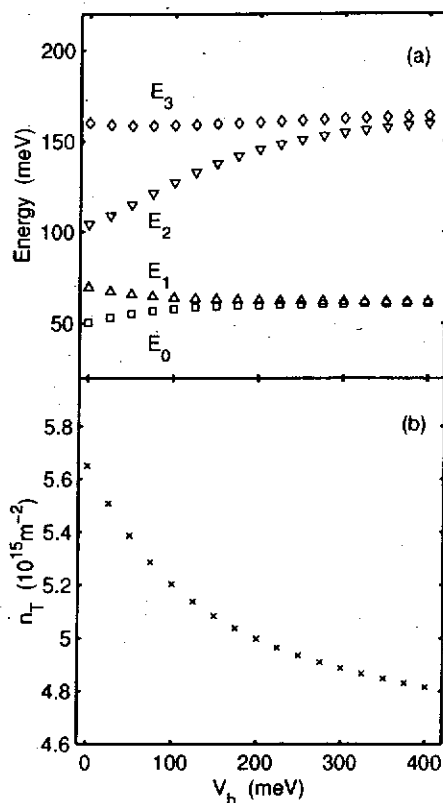


图 3.2.4 $w_1 = 10.0 \text{ nm}$, $w_2 = 10.0 \text{ nm}$ 及 $b = 3.5 \text{ nm}$ 的对称 DSQW 结构中 (a) 子带能量和 (b) 总的二维电子密度随垒高 V_b 的变化。

应于两阱中的电子密度作同位相振荡运动的激发模。在长波限下，它的色散关系为 $\omega_+(q \rightarrow 0) = [n_T e^2 q / (2m_0^* \epsilon_0 \epsilon_r)]^{1/2}$ 。插图中给出了 $w_1 = w_2 = 10.0 \text{ nm}$ 、 $b = 8.0 \text{ nm}$ 和 $V_b = 225 \text{ meV}$ 的对称 DSQW 结构中计算得到的色散曲线（实线）和长波限下的分析结果（虚线）。在相当大的 q 范围内，两条线符合得很好，只有当 q 大于 $0.3\pi/w_2$ 时两者之间才有明显的差别。能量较低的标记为 ω_- 的等离子激元模被称为“声学模”，因为它在长波下具有声学的色散关系，即 $\omega_-(q \rightarrow 0) \sim q$ ，它相应于两阱中电子密度的反位相振荡运动 [109]。从图 3.2.5 可以看出，随着 b 的增加，光学和声学等离子激元模相互靠拢，当 b 很大时都趋近于电子密度为 $n_T/2$ 的单量子阱结构中的等离子激元色散关系。

随着垒宽 b 或垒高 V_b 的减小，两层电子气体之间出现隧穿，这会对电子的多体相互作用和等离子激元谱产生重要的影响。需要指出的是，在零隧穿情形下，光学模 (ω_+) 和声学模 (ω_-) 实际上分别是子带内和子带间的集体激发。由于只有最低的两个能级被电子占据，可以用两子带模型对与这两个能级有关的等离子激元模进行分析。

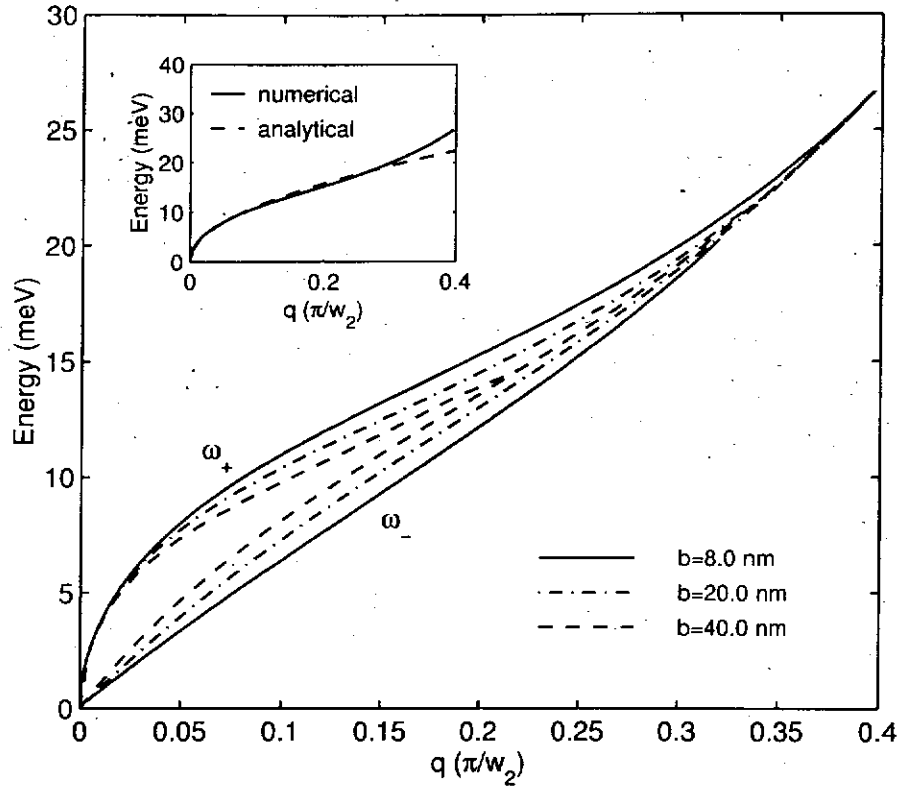


图 3.2.5 b 分别为 8.0 nm (实线)、20.0 nm (点划线) 和 40.0 nm (虚线) 时 $w_1 = w_2 = 10.0$ nm 和 $V_b = 225$ meV 的对称 DSQW 结构中能量最低的两支等离激元模的色散关系。插图中给出了 ω_+ 色散关系的数值结果和长波限下的分析结果。

在零隧穿情形下，两个简并态的波函数可近似为

$$\varphi_{\pm}(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\xi_0\left(z - \frac{b}{2} - \frac{w}{2}\right) \pm \xi_1\left(z + \frac{b}{2} + \frac{w}{2}\right) \right] \quad (3.2.16)$$

其中 $\xi_i(z)$ ($i = 0, 1$) 为第 i 个阱中电子的基态波函数，如果将 $|\xi_i(z)|$ 近似为 δ 函数，从 (3.2.14) 式可导出如下两个方程

$$\begin{aligned} V_+(\mathbf{q}) \left[\Pi_{00}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_{11}(\mathbf{q}, \omega) \right] &= 1 \\ V_-(\mathbf{q}) \left[\Pi_{10}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_{01}(\mathbf{q}, \omega) \right] &= 1 \end{aligned} \quad (3.2.17)$$

它们分别描述子带内和子带间的等离激元模。这里

$$V_{\pm}(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{4\epsilon_0\epsilon_r q} \left[1 \pm e^{-q(w+b)} \right] \quad (3.2.18)$$

上面的讨论是基于子带的观点，其中 Π_{ij} 的下标是子带的指标。还可以用层状电子气体的观点进行分析， Π_{ij} 中相应的指标代表电子层。根据文献 [109]，光学和声学

模可用方程

$$\begin{vmatrix} 1 - V(\mathbf{q})\Pi'_{00}(\mathbf{q}, \omega) & -V(\mathbf{q})e^{-q(w+b)}\Pi'_{11}(\mathbf{q}, \omega) \\ -V(\mathbf{q})e^{-q(w+b)}\Pi'_{00}(\mathbf{q}, \omega) & 1 - V(\mathbf{q})\Pi'_{11}(\mathbf{q}, \omega) \end{vmatrix} = 0 \quad (3.2.19)$$

来描述，其中 $V(\mathbf{q}) = e^2/(2\epsilon_0\epsilon_r q)$ 。注意到两电子层完全相同，应有 $\Pi'_{11}(\mathbf{q}, \omega) = \Pi'_{00}(\mathbf{q}, \omega)$ ，可得到如下两个方程

$$\begin{aligned} 1 - V(\mathbf{q}) [1 + e^{-q(w+b)}] \Pi'_{00}(\mathbf{q}, \omega) &= 0 \\ 1 - V(\mathbf{q}) [1 - e^{-q(w+b)}] \Pi'_{00}(\mathbf{q}, \omega) &= 0 \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

它们分别描述光学和声学模。在零隧穿情形下，由于关系式 $\Pi_{00} = \Pi_{01} = \Pi_{10} = \Pi_{11} = \Pi'_{00}$ 和 $V_{\pm}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}V(\mathbf{q}) [1 \pm e^{-q(w+b)}]$ 成立，这两个方程与 (3.2.17) 式完全相同，意味着从子带的观点来看，由 (3.2.20) 式确定的光学和声学模实际上是子带内和子带间的等离激元模。因而，可以预见当隧穿耦合起作用时， ω_- 模（在有限隧穿情形下标记为 ω_{10} ）会明显改变而 ω_+ 则变化很小。

为了证实这一点，图 3.2.6 中画出了 $b = 5.0 \text{ nm}$ 、 2.5 nm 及 1.0 nm 时 $w_1 = 10.0 \text{ nm}$ 、 $w_2 = 10.0 \text{ nm}$ 和 $V_b = 225 \text{ meV}$ 的对称 DSQW 结构中等离激元的色散关系。阴影区域为单粒子激发区。当 b 减小时，由于两阱之间隧穿强度的增加， $(0-0)$ 与 $(1-0)$ ， $(2-1)$ 与 $(2-0)$ ， $(3-1)$ 与 $(3-0)$ 单粒子激发区之间的间距增大。从图 3.2.6(1a), (2a) 和 (3a) 可以看出，光学模 ω_+ 对垒宽的改变不敏感，而 ω_{10} 则强烈地依赖于 b ，它由零隧穿时的声学模变成了一支带间模。在弱隧穿耦合情形下 [见图 3.2.6(a)]， ω_{10} 仍具有类声学的色散，但产生了一个长波能隙。需要特别指出的是当隧穿强度增加时， ω_{10} 在长波下偏离声学的色散关系。在强隧穿情形下 [见图 3.2.6(3a)]， ω_{10} 与单量子阱中子带间的等离激元模类似。 ω_{10} 的这种显著变化表明，在隧穿情形下动态多体效应对带间等离激元有重要影响，可以通过隧穿耦合来控制多体效应。为了更清楚的说明这一点，下面分析 ω_{10} 的退极化移动 (depolarization shift)。众所周知，在高电子密度下等离激元模的长波频率大于相应能级之间的单粒子跃迁频率，相应的频率差被称为退极化移动。数值结果表明，图 3.2.6(1a)、(2a) 和 (3a) 中 ω_{10} 的退极化移动分别为 0.7 meV 、 3.1 meV 和 7.7 meV 。更详细的结果如表 3.2.1 所示。可以看出，当势垒变薄时，退极化效应增加，这是因为当垒宽减小时，由于两层电子之间的距离减小同时总的电子密度增加，因而库仑相互作用变强。从图 3.2.6(1a), (2a) 和 (3a) 可以看出，当 b 很小时 ω_{10} 与 ω_+ 相交。随着 b 的减小， ω_{10} 向上移动。当 b 足够小时，两支模完全分离开来。需要注意的是 ω_+ 和 ω_{10} 相互独立，它们可能相交，也可能不相交，由隧穿耦合的强度决定。另外，当垒层较薄时， ω_{21} 位于 $(2-1)$ 和 $(2-0)$ 单粒子激发区之间的小区域内 [见图 3.2.6(2b) 和 (3b)]，但当 b 足够大时，它移到了两个单粒子激发区的上面 [见图 3.2.6(1b)]。 ω_{31} 模也具有类似的行为 [见图 3.2.6(1c), (2c) 和 (3c)]。从图中还可以看出，随着 b 的减小， ω_{30} 和 ω_{31} 的能量增加，而 ω_{20} 和 ω_{21} 的能量减小 [见图 3.2.6(1c), (2c) 和 (3c) 以及 3.2.6(1b),

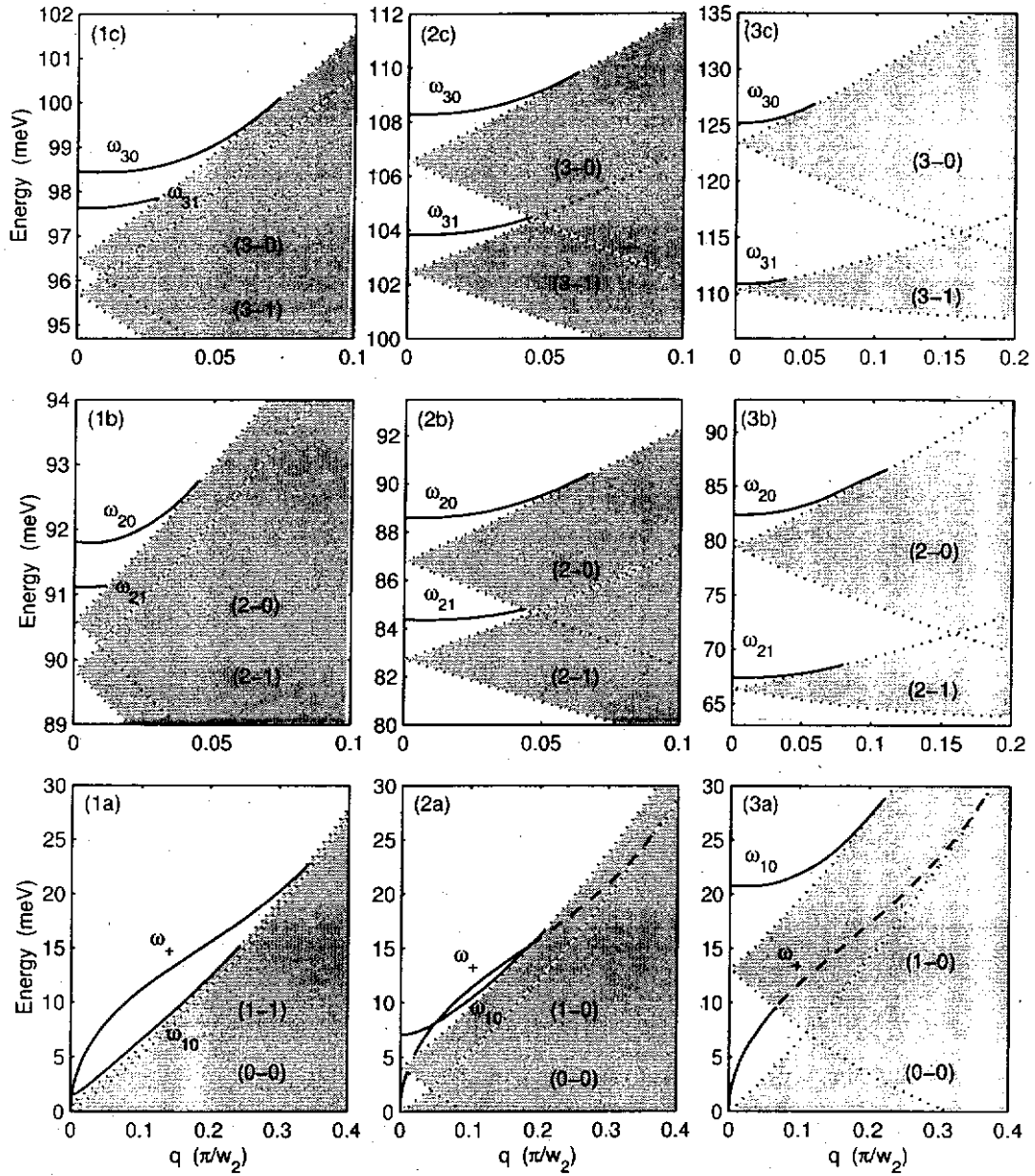


图 3.2.6 (1) $b = 5.0$ nm, (2) $b = 2.5$ nm 以及 (3) $b = 1.0$ nm 时 $w_1 = 10.0$ nm、 $w_2 = 10.0$ nm 和 $V_b = 225$ meV 的对称 DSQW 结构中等离激元的色散关系。阴影区域表示单粒子激发区。

表 3.2.1 b 取不同值时 $w_1 = w_2 = 10.0$ nm 和 $V_b = 225$ meV 的 DSQW 结构中最低的两个能级间的间距 (ΔE_{10}) 以及 ω_{10} 的退极化移动 $\Delta_{10}^{\text{shift}} = \omega_{10}(q \rightarrow 0) - \Delta E_{10}$ 。

b (nm)	ΔE_{10} (meV)	$\Delta_{10}^{\text{shift}}$ (meV)
5.0	0.8	0.7
4.5	1.1	1.0
4.0	1.4	1.2
3.5	2.2	1.7
3.0	2.7	2.2
2.5	4.0	3.1
2.0	5.5	3.9
1.5	9.0	5.9
1.0	13.0	7.7

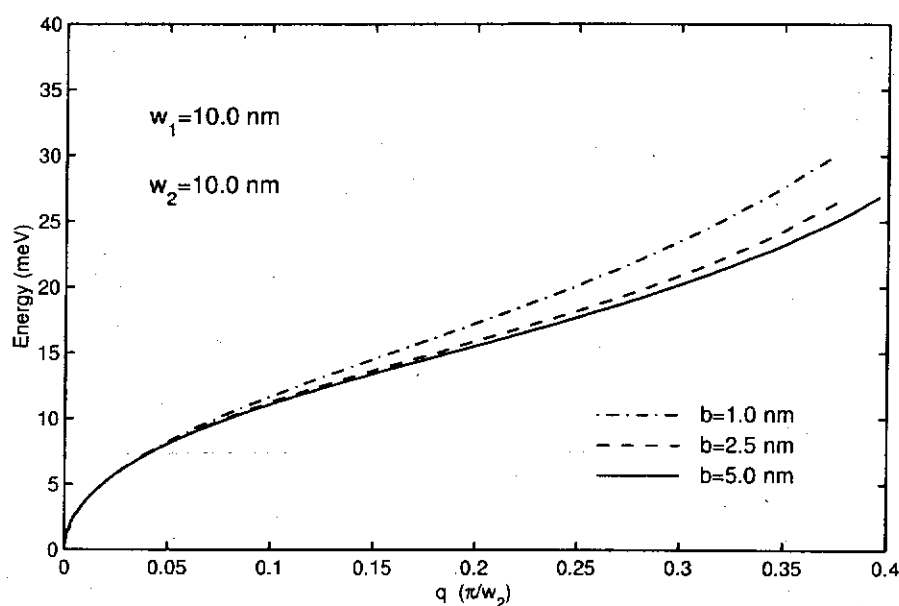


图 3.2.7 $b = 1.0$ nm (点划线), 2.5 nm (虚线) 和 5.0 nm (实线) 时 $w_1 = w_2 = 10.0$ nm 和 $V_b = 225$ meV 的对称 DSQW 结构中 ω_+ 的色散关系。

(2b) 和 (3b)]。注意到等离激元的能量主要由相应能级的间距决定, 这四支带间模的性质就不难理解了。以 ω_{31} 模为例, 当 b 减小时, E_3 和 E_1 能级之间的间距增加, 导致 ω_{31} 能量的增加。

为了揭示垒宽对光学模 ω_+ 的影响, 图 3.2.7 画出了 $b = 5.0$ nm、 2.5 nm 和 1.0 nm 时 ω_+ 的色散关系。很明显, 垒越宽时 ω_+ 的能量越低, 趋势与零隧穿情形相同 (见图 3.2.5), 表明即使在隧穿耦合范围内, ω_+ 模对垒宽的依赖关系也主要是由库仑耦合引起的, 而隧穿耦合的影响很小。

阱间势垒高度分别为 400 meV, 225 meV 和 50 meV 时 $w_1 = w_2 = 10.0$ nm, $b = 3.5$ nm 的对称 DSQW 结构中的等离激元谱如图 3.2.8 所示, 其基本特征与图 3.2.6 很

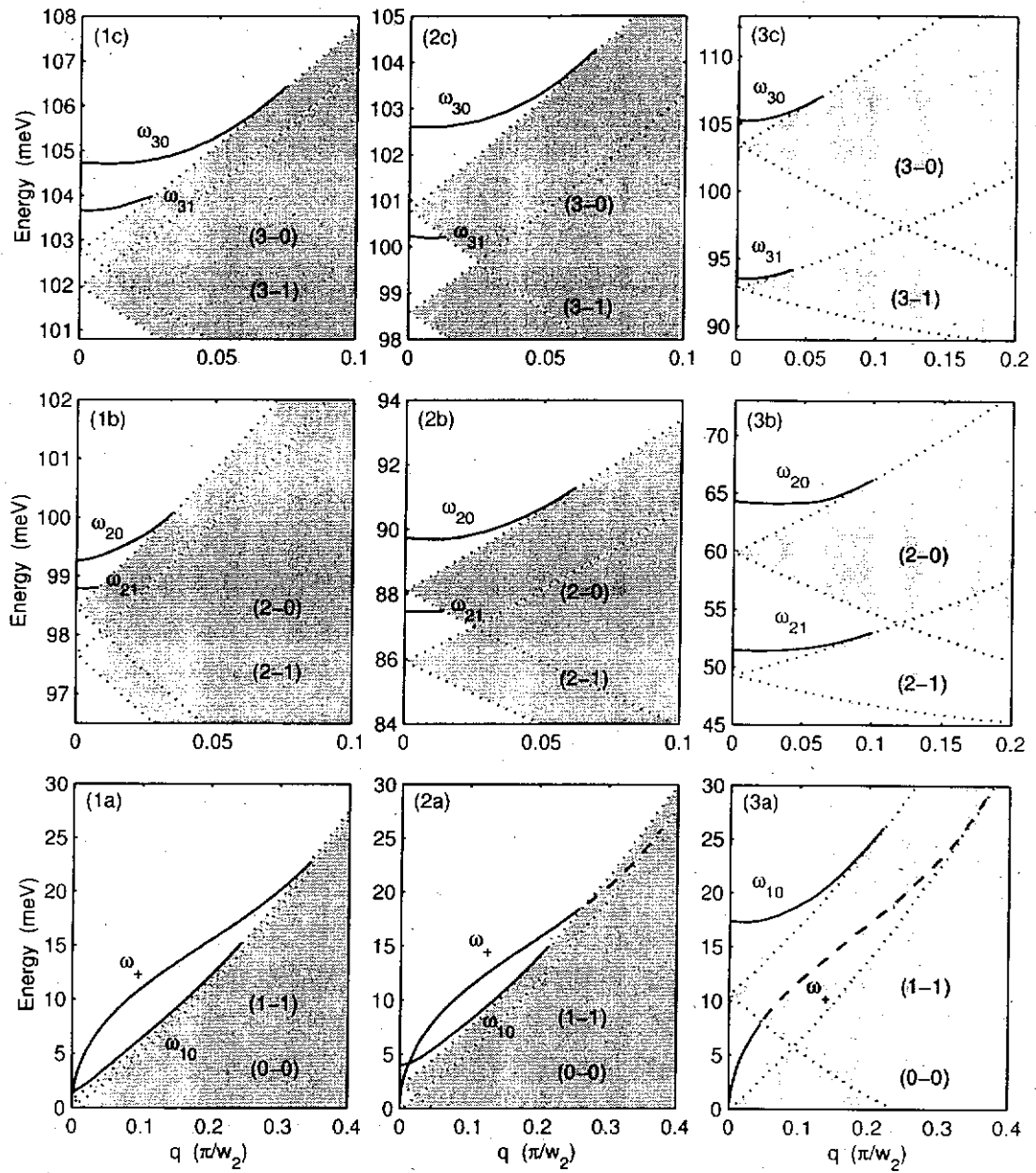


图 3.2.8 (1) $V_b = 400$ meV, (2) $V_b = 225$ meV 和 (3) $V_b = 50$ meV 时 $w_1 = w_2 = 10.0$ nm, $b = 3.5$ nm 的对称 DSQW 结构中等离激元的色散关系。

类似。仔细比较两幅图可以发现如下两个区别: (i) 随着 V_b 的减小, ω_{30} 的能量先减小, 达到某一值后开始增加; (ii) ω_{31} 的能量随 V_b 的减小而减小, 与它随 b 减小时的的变化趋势相反。这些区别源于相应能级对 b 和 V_b 不同的依赖关系。

3.2.4. 结论

本文研究了 DSQW 结构中的等离激元, 应用自洽方法求解了系统的能级和波函数。发现多体重整化对子带能级有很大的影响, 它提高了子带能级的能量, 同时显著改变了双态之间的能级间距。基于自洽场理论和线性响应理论计算了等离激元的色散关系, 重点研究了耦合强度对 DSQW 结构中等离激元的影响。在库仑耦合情形下, 隧穿效应可以忽略。当垒宽增加时, 能量最低的两支模 (光学和声学模) 相互靠拢。当垒宽较小时, 隧穿效应起重要作用。在此隧穿耦合范围内, 随垒宽 b 或垒高 V_b 的减小, 带内模 ω_+ 的变化很小, 而子带间的模有显著变化。特别地, 我们详细研究了 ω_{10} 的行为。在零隧穿时它就是声学模 ω_- , 当两电子层之间存在隧穿时, 它演变为一支子带间的模, 具有与单量子阱中子带间的模相类似的色散。 ω_{10} 色散关系急剧的变化表明动态多体效应对等离激元模有重要影响。数值结果表明, 当垒宽 b 或垒高 V_b 较大时, ω_{10} 和 ω_+ 相交, 而当 b 或 V_b 较小时, 它们不再相交。除 ω_{10} 外, 也对其它频率更高的带间模进行了研究。结果显示, 当 b 或 V_b 较小时, ω_{21} 位于 (2-1) 和 (2-0) 单粒子激发区之间, 当 b 或 V_b 足够大时, 它移到了两个单粒子激发区的上面。 ω_{31} 模具有类似的行为。

§ 3.3 隧穿耦合效应对不对称双量子阱结构中等离激元的影响

3.3.1. 引言

在过去的二十年中, 由于在揭示电子-电子多体相互作用 (如低电子密度下的交换-关联效应和库仑牵引效应等) 方面的重要性, DQW 结构中的等离激元引起了人们浓厚的理论 [40, 41, 109-115, 130] 和实验 [38, 45, 46, 123] 兴趣。然而, 迄今为止的绝大部分研究集中在对称 DQW 结构中, 不对称效应很少涉及到。在零隧穿耦合的对称 DQW 系统中, 理论上预言 [109, 110] 并在实验上观测到了光学和声学等离激元的存在 [45, 46]。这两支模分别对应于层间电荷密度同位相和反位相的集体振荡运动, 长波下的频率分别正比于 $q^{1/2}$ 和 q 。隧穿效应对对称 DQW 结构中等离激元的影响也已经被深入研究过了 [111, 112, 114], 发现存在隧穿时声学模产生了一个长波能隙。在对称的 DQW 结构中, 光学和声学等离激元模相互独立, 可以相交。除了对称 DQW 结构中的等离激元已被广泛研究外, 不对称的单量子阱 (SQW) 和 DQW 结构中的不对称效应也被几个作者考虑过了。Jian 等人 [113] 研究了不对称 SQW 结构和由相距 940 Å 的两个不对称 SQW 组成的结构中的等离激元。在这两

种结构中, 系统的不对称性质都导致了某些模之间的耦合及反交叉 (anti-crossing) 现象。最近, Wendler 等人 [114] 考虑了强隧穿情形下不对称的双抛物型量子阱中的等离激元, 发现了分别与对称结构中子带内和子带间的等离激元相对应的两支模。然而, 与对称的 DQW 结构中的等离激元所不同的是, 这两支模相互排斥, 导致与文献 [113] 中的图 3 相类似的反交叉现象。

从子带的观点来看, 对称 DQW 结构中的等离激元可分为子带内和子带间的模, 在零隧穿时带间模 ω_{10} 就是声学等离激元支 [111], 存在隧穿时, 这支模产生了一个长波能隙 [112]。事实上, 对称的 DQW 结构中有两支子带内的模, 即 ω_+ (光学模) 和 ω_- , 但 ω_- 始终位于单粒子激发区内部而被阻尼掉了 [114]。因而, 只能得到 ω_+ 和 ω_{10} 两支模。但在不对称的 DQW 中, 子带内和子带间的模是耦合在一起的, 不能被分离开来。考虑到对称和不对称 DQW 结构性质的差别, 在某些条件下, 不对称效应以及激发模之间的耦合有可能使 ω_- 成为一支无阻尼的模。在文献 [114] 中, 作者只考虑了强隧穿的情形, 没有发现 ω_- 。通过控制隧穿强度来调节不对称 DQW 结构中的多体相互作用, 在强隧穿时原本阻尼的 ω_- 有可能移出单粒子激发区, 从而观测到三支模共存的现象。

根据上面的想法, 在本节中我们研究隧穿效应对不对称 DQW 结构中等离激元的影响, 特别地, 详细研究了等离激元模随隧穿强度的变化。据我们所知, 这是该方向第一个系统的研究。结果表明, 隧穿效应对等离激元有很大的影响, 不对称 DQW 结构中可能有两支或三支非阻尼模, 具体数目依赖于隧穿强度。长波下色散为 $\omega_+ \sim q^{1/2}$ 的带内模在所有的情形下都存在。在弱耦合情形下, 光学模和具有长波声学色散的带内模 ω_- 位于单粒子激发区外。在强隧穿情形下, 带间模 (ω_{10}) 与 ω_+ 共存, 而弱隧穿时无阻尼的 ω_- 模则消失了。在某些隧穿强度下这三支模可以共存。另外, 我们也发现了 ω_+ 和 ω_{10} 之间的反交叉现象。需要注意的是, 在不对称结构中, 所有的模都是耦合在一起的。因而严格地说, 在不对称 DQW 结构中不存在纯的带内模和带间模。但为了讨论的方便, 我们保留了对称情形下的这一套记法。

3.3.2. 公式和分析

众所周知, 等离激元由系统动态介电函数行列式的零点确定, 介电函数可写为

$$\epsilon_{ll',nn'}(\mathbf{q}, \omega) = \delta_{ln'}\delta_{ln} - U_{ll',nn'}(\mathbf{q})\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.3.1)$$

其中

$$U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) = \iint \varphi_l^*(z)\varphi_{l'}(z)U(\mathbf{q}, z, z')\varphi_n^*(z')\varphi_{n'}(z')dzdz' \quad (3.3.2)$$

是库仑相互作用的矩阵元,

$$\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar(\omega + i0^+) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (3.3.3)$$

是电子的极化函数。这里，

$$U(\mathbf{q}, z, z') = \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 q} e^{-q|z-z'|} \quad (3.3.4)$$

是 $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 的二维 Fourier 变换, $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 是分别位于 $\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{r}'$ 的两个电子之间的库仑相互作用。在两子带模型下, 等离激元由

$$\begin{vmatrix} 1 - U_{00,00}\chi_{00} & -U_{00,10}\chi_{10} & -U_{00,11}\chi_{11} \\ -U_{10,00}\chi_{00} & 1 - U_{10,10}\chi_{10} & -U_{10,11}\chi_{11} \\ -U_{11,00}\chi_{00} & -U_{11,10}\chi_{10} & 1 - U_{11,11}\chi_{11} \end{vmatrix} = 0 \quad (3.3.5)$$

决定, 其中

$$\chi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_{n'n}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + \delta_{nn'}} \quad (3.3.6)$$

在对称的 DQW 结构中, 如果 $l + l' + n + n'$ 是奇数, 则有 $U_{ll',nn'} = 0$, 因而方程 (3.3.5) 可分解为两个方程

$$\begin{vmatrix} 1 - U_{00,00}\chi_{00} & -U_{00,11}\chi_{11} \\ -U_{11,00}\chi_{00} & 1 - U_{11,11}\chi_{11} \end{vmatrix} = 0 \quad (3.3.7)$$

和

$$1 - U_{10,10}\chi_{10} = 0 \quad (3.3.8)$$

它们分别描述子带内和子带间的模。在零隧穿时, ω_{10} 在长波限下具有声学的色散关系; 当存在隧穿时, 它产生了一个长波能隙。与对称系统相比, 不对称 DQW 结构中的等离激元有很大的不同。由于系统的不对称性, 当 $l + l' + n + n'$ 为奇数时 $U_{ll',nn'}$ 不为零, 因而 (3.3.5) 式不能分解为低阶的方程, 意味着所有的模都是耦合在一起的。然而, 如果系统偏离对称情形不是很严重的话, $l = l', n = n'$ 的矩阵元仍会远大于 $l + l' + n + n' = \text{奇数}$ 的矩阵元。在这种情形下, 可近似地将 (3.3.5) 式分解为 (3.3.7) 式和 (3.3.8) 式。

首先考虑由 (3.3.7) 式确定的子带内的等离激元模。将 χ_{00} 和 χ_{11} 展开到 q 的最低次项, 得 $\chi_{00}(\mathbf{q}, \omega) = N_0 q^2 / m^* \omega^2$ 和 $\chi_{11}(\mathbf{q}, \omega) = N_1 q^2 / m^* \omega^2$, 其中 N_0 (N_1) 是 E_0 (E_1) 能级的二维电子密度。将这两个表达式应用到 (3.3.7) 式中, 可得两个解

$$\begin{aligned} \omega_{\pm}^2 &= \frac{qe^2}{4m^* \epsilon_0 \epsilon_r} (f_{00,00} N_0 + f_{11,11} N_1) \\ &\times \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4(f_{00,00} f_{11,11} - f_{00,11}^2) N_0 N_1}{(f_{00,00} N_0 + f_{11,11} N_1)^2}} \right) \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

其中

$$f_{ll',nn'}(q) = \iint \varphi_l^*(z) \varphi_{l'}(z) e^{-q|z-z'|} \varphi_n^*(z') \varphi_{n'}(z') dz dz' \quad (3.3.10)$$

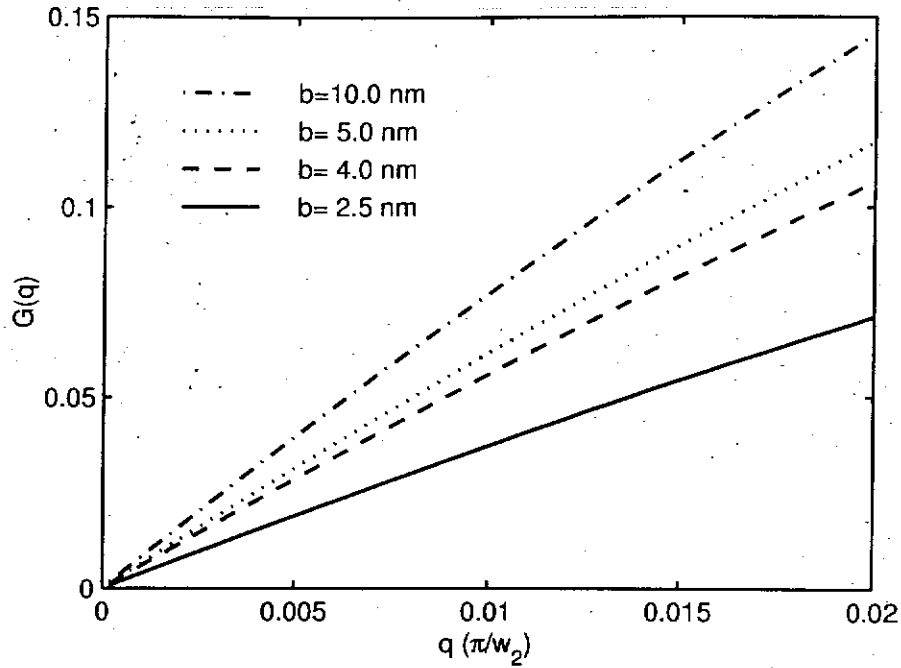


图 3.3.1 $b = 10.0$ nm, 5.0 nm, 4.0 nm 和 2.5 nm 时 $w_1 = 22.5$ nm, $w_2 = 20.0$ nm, $V_b = 180$ meV 和 $n_{2\text{DEG}} = N_0 + N_1 = 1.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的不对称 DQW 结构中的 $G(q)$ - q 关系。这里, w_1 和 w_2 是两个阱的宽度, b 和 V_b 分别是两阱之间势垒的宽度和高度, $n_{2\text{DEG}}$ 是总的二维电子密度。

由于关系式 $(f_{00,00}f_{11,11} - f_{00,11}^2)N_0N_1 \ll (f_{00,00}N_0 + f_{11,11}N_1)^2$ 成立, 这两个解可近似为

$$\omega_+^2 \approx \frac{qe^2}{2m^*\epsilon_0\epsilon_r} (f_{00,00}N_0 + f_{11,11}N_1) \quad (3.3.11)$$

和

$$\omega_-^2 \approx \frac{qe^2}{2m^*\epsilon_0\epsilon_r} \left(\frac{N_0N_1}{f_{00,00}N_0 + f_{11,11}N_1} \right) G(q) \quad (3.3.12)$$

其中 $G(q) = f_{00,00}(q)f_{11,11}(q) - f_{00,11}^2(q)$ 。对于对称的 DQW 结构而言, 在整个隧穿范围内, 长波限下恒有 $f_{00,00}(q) \approx f_{11,11}(q) \approx f_{00,11}(q)$ 成立, 故有 $\omega_- \rightarrow 0$, 意味着 ω_- 总是位于单粒子激发区内部而被阻尼掉了, 因而 ω_+ 是唯一的一支无阻尼的带内模。在不对称的 DQW 结构中, 情况就完全不同了。与对称情形下类似, ω_+ 在所有隧穿强度下都存在, 在长波下具有光学的色散, 即 $\omega_+(q \rightarrow 0) \sim q^{1/2}$ 。对于 ω_- 而言, 我们发现它可能是阻尼的, 也可能是无阻尼的, 取决于隧穿强度的大小。根据我们的数值结果, $G(q)$ 在长波限下近似地正比于 q , 如图 3.3.1 所示, 图中给出了不同垒宽时 $w_1 = 22.5$ nm, $w_2 = 20.0$ nm, $V_b = 180$ meV 和 $n_{2\text{DEG}} = N_0 + N_1 = 1.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的不对称 DQW 结构中的 $G(q)$ - q 关系。根据该关系式并考虑到当 $q \rightarrow 0$ 时 $f_{00,00}(q) \approx f_{11,11}(q) \rightarrow 1$, 可知 ω_- 具有声学的色散关系。从图 3.3.1 中还可以看出, 垒宽 b 越小时 $G(q)$ 的值越小, 这是因为随着隧穿强度的增大, $f_{00,00}$ (或 $f_{11,11}$) 与 $f_{00,11}$ 之间的差别减小。因而, 在弱隧穿下 ω_- 总是无阻尼

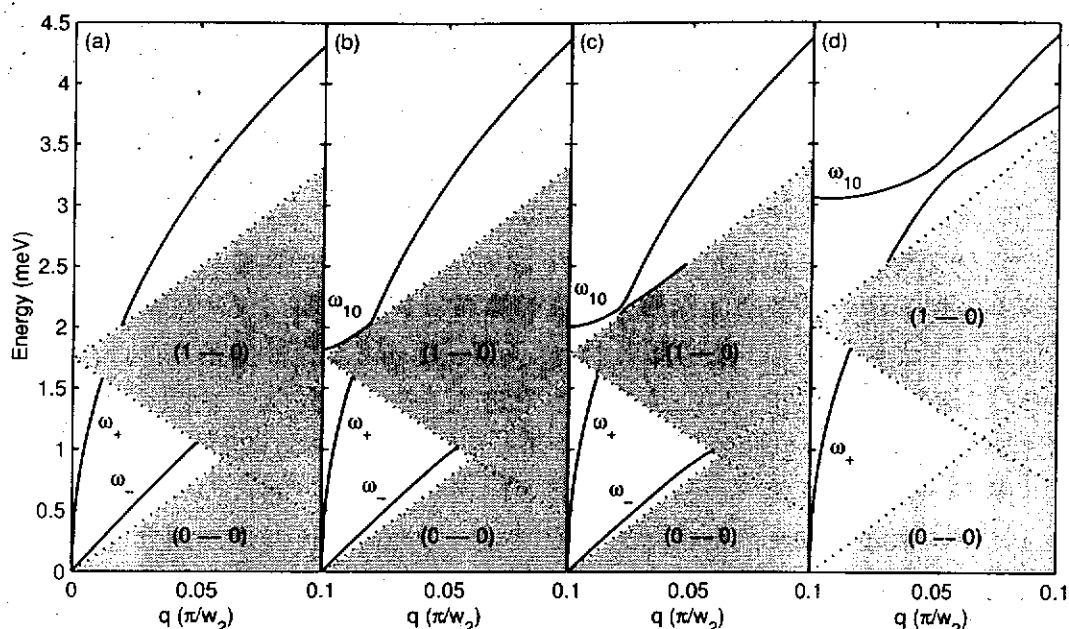


图 3.3.2 (a) $b = 10.0$ nm, (b) $b = 5.0$ nm, (c) $b = 4.0$ nm 和 (d) $b = 2.5$ nm 时 $w_1 = 22.5$ nm, $w_2 = 20.0$ nm 的不对称 DQW 结构中等离激元的色散关系, 其中的阴影区域表示单粒子激发区。

的, 但随着隧穿强度的增加, 它逐渐向 (0-0) 单粒子激发区靠拢。一旦隧穿强度超过某一临界值, ω_- 就会进入单粒子激发区而被阻尼掉。

现在讨论子带间的等离激元模, 它由 (3.3.8) 式确定。在对称的 DQW 结构中, ω_{10} 在所有的隧穿强度下都是无阻尼的。在有限隧穿情形下, ω_{10} 具有一个长波能隙。由于动态多体效应, 在长波下它位于相应的 (1-0) 单粒子激发区上面。随着隧穿强度的减小, ω_{10} 和 (1-0) 单粒子激发区都向下移动。在这个过程中, ω_{10} 始终位于 (1-0) 单粒子激发区上面。因而在对称的 DQW 系统中, ω_{10} 在长波限下是无阻尼的。在不对称的 DQW 结构中, ω_{10} 的这个特征可能会由于不对称效应而发生显著的改变, 即 ω_{10} 可能在某些情形下变成阻尼的。

3.3.3. 数值结果和讨论

为了验证以上关于 ω_+ 、 ω_- 和 ω_{10} 的分析, 我们根据方程 (3.3.5) 计算了 (a) $b = 10.0$ nm, (b) $b = 5.0$ nm, (c) $b = 4.0$ nm 和 (d) $b = 2.5$ nm 时 $w_1 = 22.5$ nm, $w_2 = 20.0$ nm 的不对称 DQW 结构中的等离激元。这里, w_1 和 w_2 分别是两个阱的宽度。在计算中取垒高 $V_b = 180$ meV, 取总的二维电子密度 $n_{2\text{DEG}} = 1.6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, 取背景的介电常数 $\epsilon_r = 12.87$ 。结果如图 3.3.2 所示, 可以看出, 子带内的光学模在所有的隧穿强度下都存在, 而子带内的声学模 (ω_-) 和带间模 (ω_{10}) 分别在弱隧穿和强隧穿情形下才存在。在中等隧穿强度下, 这三支模可以共存。图 (a)、(b) 和 (c) 清楚地表明了 ω_- 的演化过程, 弱隧穿时它位于 (0-0) 单粒子激发区上面, 随着 b 的减小, 它逐

渐靠近并最终进入 (0-0) 单粒子激发区而被阻尼掉。类似地, 随着 b 的增大, ω_{10} 逐渐靠近 (1-0) 单粒子激发区, 如图 (b)、(c) 和 (d) 所示。

数值结果表明不对称效应对量子阱结构中的等离子激元有重要影响。这些效应来源于不对称系统中带内模和带间模之间的耦合。这种等离子激元模之间的耦合效应引起相关模的反交叉现象, 文献 [113] 和 [114] 已经对此作了讨论。等离子激元模之间的耦合所引起的更为重要的效应是在不同隧穿强度下 ω_- 和 ω_{10} 阻尼性质的变化。作为本文的主要结论之一, 耦合效应对等离子激元阻尼性质的影响是双量子阱中集体激发方面的第一个系统的研究。Wendler 等人 [114] 没有发现 ω_- 模, 因为它们的讨论仅限于强隧穿范围内, ω_- 是阻尼的, 相应于本文图 3.3.2(d) 的情形。在文献 [113] 中, 作者研究了不对称 SQW 中的等离子激元, 其中不对称性是通过使量子阱的一半提升一定的能量来实现的。事实上, 这个结构可看成是垒宽为零的双量子阱, 认识到这一点, 他们的数值结果就不难理解了。他们还研究了由相距 940 Å 的两个不对称单量子阱所构成的系统中的等离子激元 (见文献 [113] 的图 4)。同样, 该系统不应再被视为 DQW 结构, 而应看成是由四个量子阱构成的系统。

比较不同隧穿强度下的等离子激元, 可以发现隧穿对 ω_+ 的影响相对来说比较小, 但对 ω_- 和 ω_{10} 则有重要的影响。这些效应表现在两个方面: 一方面, 隧穿效应改变了这两支模的频率; 但更为重要的是, 隧穿效应改变了 ω_- 和 ω_{10} 的阻尼性质。由于 (0-0) 和 (1-0) 两个单粒子激发区的变化很小, 这两支激发模频率和阻尼性质的变化主要是由动态多体效应引起的。众所周知, 带间模的退极化移动反映了动态多体效应的大小。为了弄清楚多体效应的大小, 现在分析 ω_{10} 的退极化移动 ($\Delta_{10}^{\text{shift}}$)。从图 3.3.2 可以看出, $\Delta_{10}^{\text{shift}}$ 从 $b = 2.5 \text{ nm}$ 时的 1.01 meV 降到了 $b = 5.0 \text{ nm}$ 时的 0.07 meV, 揭示了隧穿效应对动态多体相互作用的重要影响。这意味着可以通过调节隧穿强度来控制多体相互作用。因而, 不同隧穿强度下不对称 DQW 结构中等离子激元的变化提供了一个研究多体效应的有用工具。

如前所述, 本文的一个新的重要发现是在一定的耦合强度范围内, 子带内的光学模 (ω_+) 和声学模 (ω_-) 以及带间模 (ω_{10}) 能够共存。要在实验上同时观测到这三支模, 需要仔细地控制阱层和垒层的宽度及电子密度等参数, 分子束外延和调制掺杂等制备技术的迅速发展已经使人们能制备出符合条件的样品。另外, 非弹性光散射已成为探测低维系统中等离子激元色散关系的有力工具。例如, 最近 Kainth 等人 [45,46] 成功地应用该项技术测量了 DQW 结构中光学和声学等离子激元的色散关系。因而我们相信, 本文中的预言可以通过非弹性光散射实验来验证。

3.3.4. 结论

我们研究了隧穿强度对不对称 DQW 结构中等离子激元的影响, 发现在弱隧穿和中等隧穿强度下存在一支无阻尼的带内模 ω_- , 它在长波下具有声学的色散关系。这

支模在对称的 DQW 结构中总是阻尼的。同时发现, 带间模 ω_{10} 在弱隧穿时是阻尼的。在适当的隧穿强度下, ω_+ 、 ω_- 和 ω_{10} 可以共存。数值结果表明, 随着隧穿强度的变化, ω_{10} 的频率和退极化移动发生了显著的变化。不同隧穿强度时不对称 DQW 系统中等离子激元的性质是研究多体效应的一个有用的工具。

§ 3.4 不对称双量子阱结构中的等离子激元

3.4.1. 引言

作为固体物理中一个重要而基本的问题, 几十年来多体相互作用一直受到人们的关注。两分量的低维电子气系统(如双量子阱和双量子线结构)为这方面的研究提供了理想的实验对象, 因为阱间或线间的库仑相互作用使电子的动能受到抑制, 多体效应占主导地位。事实上, 自从预言存在一支无阻尼的声学等离子激元后 [109], 在过去的二十年中, DQW 结构中的等离子激元引起了人们广泛的兴趣。正如已被指出的那样, 这支声学模敏感地受到隧穿及局域场效应的影响, 其性质可被用来研究多体效应。因而, 它存在于 DQW 结构中的预言激发了该领域大量的理论 [41, 110–115, 117, 118] 和实验 [38, 45, 123] 研究工作。最近, 这支声学模已经在半导体 DQW 系统中通过非弹性光散射实验观察到了 [45]。然而到目前为止, 绝大部分的研究集中在对称系统中 [38, 41, 45, 109–112, 115, 117, 123], 不对称效应很少涉及到。

在最近的一篇文章中 [118], 我们在 RPA 下研究了隧穿耦合对不对称 DQW 结构中等离子激元的影响。在本节中, 我们突破简单的 RPA, 将交换-关联效应考虑进来, 在 TDLDA [9] 下研究实际的不对称 DQW 结构中的等离子激元, 目的是系统地研究空间不对称效应对 DQW 结构中等离子激元的影响; 另外还计算了能反映共振非弹性光散射实验中光谱强度分布的光谱权重。

3.4.2. 公式

我们的不对称 DQW 结构包含两个 GaAs 层(宽度分别为 W_1 和 W_2), 中间是未掺杂的 AlGaAs 层(宽度为 b), 两边是两个部分掺杂的 AlGaAs 层。每一个部分掺杂的垒层又由间隔层(宽度为 s_1 或 s_2)和均匀掺杂层(掺杂浓度为 N_D)组成。考虑到耗尽效应, 假设掺杂层中的施主部分电离; 耗尽层的厚度 d_1 和 d_2 是自洽求解出来的。在本节中, 我们采用局域密度泛函理论 [9] 来自洽地求解单电子的 Schrödinger 方程和泊松方程, 以获得子带能级和波函数。在局域密度近似(LDA)下, 电子的运动方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + V_{eff}(z) \right] \xi_i(z) = E_i \xi_i(z) \quad (3.4.1)$$

其中 $V_{eff}(z) = V_0(z) + V_H(z) + V_{xc}(z)$ 是有效势, $m^*(z)$ 是与位置有关的电子的有效质量。这里 $V_0(z)$, $V_H(z)$ 和 $V_{xc}(z)$ 分别代表量子阱的限制势、Hartree 势和交换-关联势。Hartree 势满足方程

$$\frac{d^2}{dz^2} V_H(z) = -\frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r} [n(z) - N_d(z)] \quad (3.4.2)$$

其中 ϵ_r 是背景半导体的相对介电常数, ϵ_0 是真空介电常数, $n(z)$ 是 z 方向电子的密度分布, $N_d(z)$ 是与位置有关的离化杂质密度。 z 方向的电子密度由方程

$$n(z) = \sum_i \frac{m_0^*}{\pi \hbar^2} (E_F - E_i) \Theta(E_F - E_i) |\xi_i(z)|^2 \quad (3.4.3)$$

给出, 其中 m_0^* 是 GaAs 中电子的有效质量, E_F 是费米能级, $\Theta(x)$ 是 Heaviside 单位阶跃函数。交换-关联势可写为 [131]

$$V_{xc}(z) = -0.985 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} n^{1/3}(z) \left\{ 1 + \frac{0.034}{a_B^* n^{1/3}(z)} \ln [1 + 18.376 a_B^* n^{1/3}(z)] \right\} \quad (3.4.4)$$

其中有效玻尔半径 $a_B^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_r \hbar^2 / m_0^* e^2$ 。我们在 Numerov 算法中应用“转折点”匹配的方法来自洽地求解上述方程 [117, 129]。

等离激元的色散关系是在 TDLDA 下应用自洽求得的 LDA 子带能级和波函数计算出来的。在 TDLDA 下, 有效的交换-关联相互作用可近似地写为 [9, 127]

$$V_{ll',nn'}^{xc} = \int dz \xi_l(z) \xi_{l'}(z) \frac{\partial V_{xc}[n(z)]}{\partial n(z)} \xi_n(z) \xi_{n'}(z) \quad (3.4.5)$$

在标准的自洽场理论 [60] 和线性响应理论 [122] 中引入交换-关联修正, 可将介电函数的矩阵元写为

$$\epsilon_{ll',nn'}(\mathbf{q}, \omega) = \delta_{ln'} \delta_{ln} - [U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) + V_{ll',nn'}^{xc}] \Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.4.6)$$

其中

$$U_{ll',nn'}(\mathbf{q}) = \iint dz dz' \xi_l(z) \xi_{l'}(z) \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 q} e^{-q|z-z'|} \xi_n(z') \xi_{n'}(z') \quad (3.4.7)$$

$$\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\hbar(\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (3.4.8)$$

这里, $f_n(\mathbf{k})$ 是态 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 的占据几率, $E_n(\mathbf{k})$ 是 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 的能量, η 是反映杂质散射的唯象参数。等离激元的色散关系由方程

$$\det(\epsilon) = 0 \quad (3.4.9)$$

给出。

光谱权重或电荷密度激发的动态结构因子 $S(\mathbf{q}, q_z, \omega)$ 由动态极化率（密度-密度关联函数） $D(\mathbf{q}, q_z, \omega)$ 的虚部给出 [112]。这里 q_z 是垂直于电子气体层的探测波矢。动态极化率 [113, 132]

$$D(\mathbf{q}, q_z, \omega) = \iint dz dz' e^{-iq_z(z-z')} D(z, z'; \mathbf{q}, \omega) \quad (3.4.10)$$

其中

$$D(z, z'; \mathbf{q}, \omega) = \sum_{i,j,k,l} D_{ij,kl}(\mathbf{q}, \omega) \xi_i(z) \xi_j(z) \xi_k(z') \xi_l(z') \quad (3.4.11)$$

$$D_{ij,kl}(\mathbf{q}, \omega) = \Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) \delta_{ik} \delta_{jl} + \sum_{m,n} \Pi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) \left[U_{ij,mn}(\mathbf{q}) + V_{ij,mn}^{xc} \right] D_{mn,kl}(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.4.12)$$

3.4.3. 数值结果和分析

众所周知，对称的 DQW 结构中的等离激元可分为两组，即偶宇称模和奇宇称模。在 TD LDA 和两子带模型下，这两组模分别由方程

$$\begin{vmatrix} 1 - (U_{00,00} + V_{00,00}^{xc})\chi_{00} & -(U_{00,11} + V_{00,11}^{xc})\chi_{11} \\ -(U_{11,00} + V_{11,00}^{xc})\chi_{00} & 1 - (U_{11,11} + V_{11,11}^{xc})\chi_{11} \end{vmatrix} = 0 \quad (3.4.13)$$

和

$$1 - (U_{10,10} + V_{10,10}^{xc})\chi_{10} = 0 \quad (3.4.14)$$

给出，其中

$$\chi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\Pi_{nn'}(\mathbf{q}, \omega) + \Pi_{n'n}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + \delta_{nn'}} \quad (3.4.15)$$

在两子带模型下，偶宇称模和奇宇称模分别对应于带内模和带间模。将 χ_{00} 和 χ_{11} 展开到 q 的最低次项，可以发现 (3.4.13) 式实际上是一个二次方程，应该有两个解 $\omega_{\pm}$ ，但其中的一支带内模 ω_{-} 始终位于单粒子激发区内部而被阻尼掉了。因而，只有带内的“光学模”出现在集体激发区。子带间的集体激发模由 (3.4.14) 式确定，它和 ω_{+} 的性质已经被深入研究过了。在零隧穿时， ω_{10} 在长波下具有声学的色散，因而被称为“声学模”；在有限隧穿的情形下，它产生了一个长波能隙。

在不对称的 DQW 结构中，情况就完全不同了。由于波函数的不对称性质，(3.4.9) 式不能分解为低阶的方程，意味着所有的等离激元模是耦合在一起的。这种不对称性对等离激元的色散和阻尼性质有很大的影响。事实上，对称 DQW 结构中原本阻尼的带内模 ω_{-} 现在移出了单粒子激发区，变成了一支无阻尼的模。另外，由于 ω_{+} 和 ω_{10} 之间的耦合效应，这两支模不再相交，出现所谓的反交叉现象。

在计算中取 $s_1 = s_2 = 50 \text{ \AA}$ ， $N_D = 5.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ， $\epsilon_r = 12.87$ ， $m_0^* = 0.067m_e$ (m_e 是裸电子的质量)， $\eta = 0.1 \text{ meV}$ ，取垒层中电子的有效质量 $m_b^* = 0.087m_e$ ，阱层和垒层中电子导带的带阶为 180 meV 。为了显示不对称程度对电荷密度激发的影响，

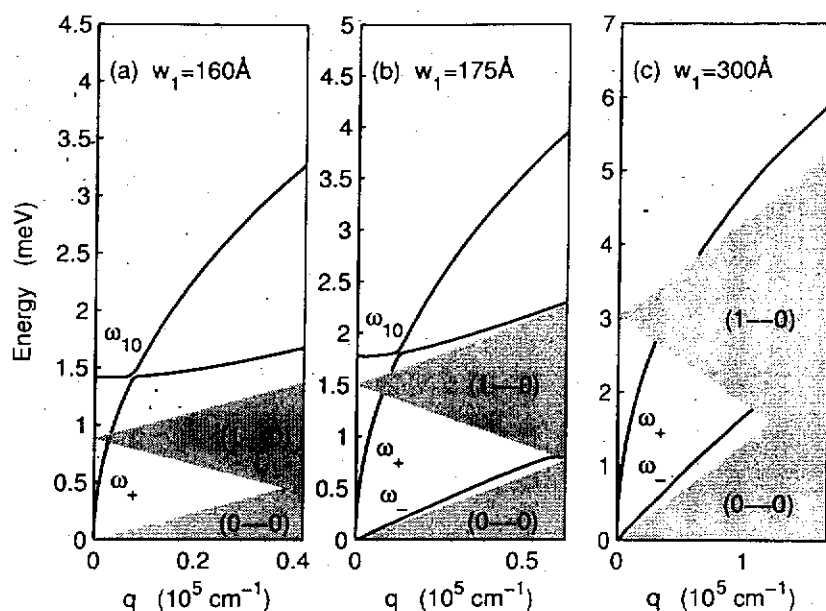


图 3.4.1 固定 $W_2 = 150 \text{ Å}$ 而使 W_1 取不同的值时 $b = 40 \text{ Å}$, $n_{2D} = 3.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的不对称 DQW 结构中等离激元的色散关系。阴影区域表示单粒子激发区。

计算了当固定 W_2 而使 W_1 逐渐增加时等离激元的色散关系, 结果如图 3.4.1 所示, 其中 $W_2 = 150 \text{ Å}$, $b = 40 \text{ Å}$, $n_{2D} = 3.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。这里 n_{2D} 是量子阱系统中的二维电子密度, 阴影区域表示单粒子激发区。可以看出, 当系统稍微偏离对称时 [见图 3.4.1(a)], ω_- 仍位于 (0-0) 单粒子激发区内部。随着 W_1 的增大, 系统的不对称程度增加, ω_- 逐渐移出了 (0-0) 单粒子激发区, 如图 3.4.1(b) 和 (c) 所示。不对称性对 ω_{10} 的色散和阻尼性质也有很大的影响。在普通电子密度下 ($n_{2D} > 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), ω_{10} 在长波下总是位于 (1-0) 单粒子激发区的上面。但在不对称系统中, 可以看出随着不对称程度的增加, ω_{10} 逐渐向 (1-0) 单粒子激发区靠近并最终被阻尼掉。数值结果表明, 在适当的条件下 [见图 3.4.1(b)], 两支带内模 $\omega_{\pm}$ 和带间模 ω_{10} 可以共存。另外也可以看到 ω_- 和 ω_{10} 的反交叉现象, 如图 3.4.1(a) 和 (b) 所示。

在 TDLDA 下, 垒宽取不同值时不对称 DQW 结构中等离激元的色散关系如图 3.4.2 所示, 其中 $W_1 = 175 \text{ Å}$, $W_2 = 150 \text{ Å}$, $n_{2D} = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。随着垒宽的增加, ω_- 移出了 (0-0) 单粒子激发区而 ω_{10} 逐渐向 (1-0) 单粒子激发区靠拢并最终被阻尼掉。当垒宽在 40 Å 左右时, 三支模能够共存。比较图 3.4.2 和图 3.4.1 可以发现两幅图的基本特征很相似, 这是因为当增加垒宽时, 电子更加局域在两个阱中, 因而系统的不对称程度增加。

不同电子密度下 $W_1 = 175 \text{ Å}$, $W_2 = 150 \text{ Å}$, $b = 40 \text{ Å}$ 的不对称 DQW 结构中等离激元的色散关系如图 3.4.3 所示, 粗实线和粗虚线分别是 TDLDA 和 RPA 下的结果, 细实线和细虚线分别是 TDLDA 和 RPA 下单粒子激发区的边界。对 ω_+ 与 ω_-

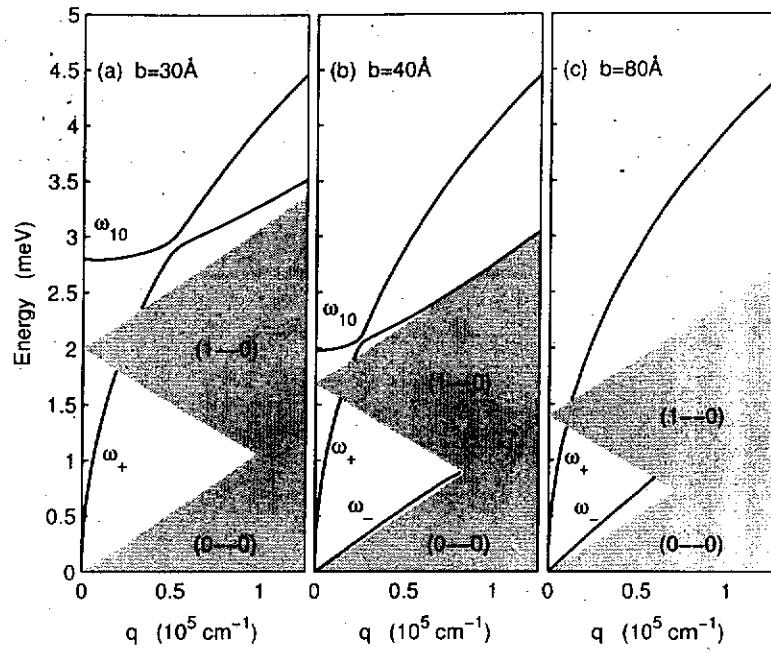


图 3.4.2 全宽取不同值时 $W_1 = 175 \text{ Å}$, $W_2 = 150 \text{ Å}$, $n_{2D} = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的不对称 DQW 结构中
等离激元的色散关系。阴影区域代表单粒子激发区。

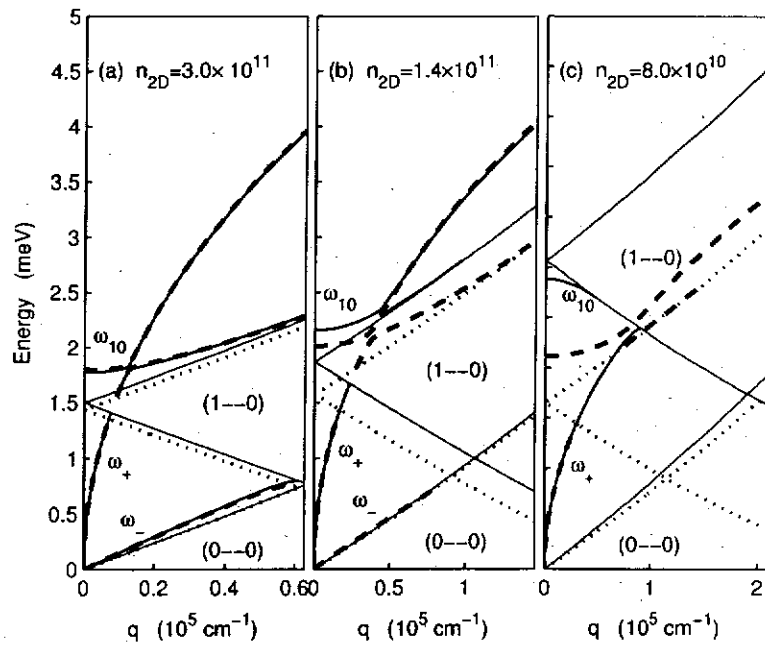


图 3.4.3 不同电子密度下参数为 $W_1 = 175 \text{ Å}$, $W_2 = 150 \text{ Å}$, $b = 40 \text{ Å}$ 的不对称 DQW 结构中等离激
元的色散关系，粗实线和粗虚线分别是 TDLDA 和 RPA 下的结果，细实线和细虚线分别是 TDLDA 和
RPA 下单粒子激发区的边界。

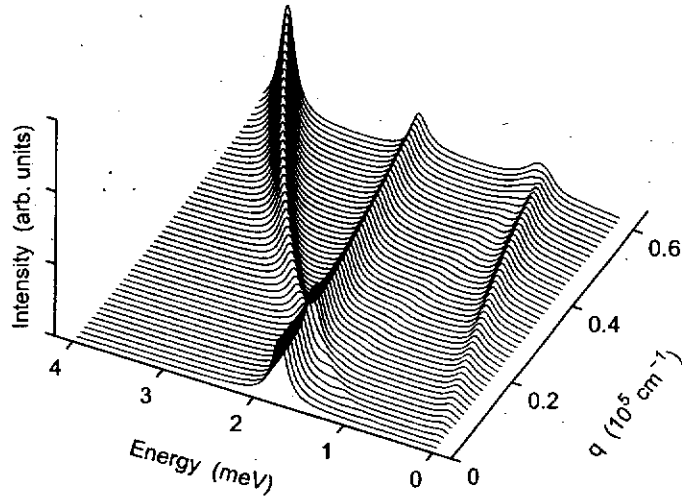


图 3.4.4 不同波矢下参数为 $W_1 = 175 \text{ \AA}$, $W_2 = 150 \text{ \AA}$, $b = 40 \text{ \AA}$ 和 $n_{2D} = 3.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的不对称 DQW 结构中激发谱的光谱权重。

的色散关系和阻尼性质而言, 两种近似结果之间的差别不大, 但交换-关联效应对子带能级和带间模 ω_{10} 的影响明显地依赖于电子密度。当电子密度为 $3.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时, TDLDA 和 RPA 结果之间的差别很小, 说明此时交换-关联效应很小。随着电子密度的降低, 两种近似结果之间的差别增大。当电子密度进一步降低时, 交换-关联效应变得非常重要。在 RPA 下, ω_{10} 始终位于 (1-0) 单粒子激发区上面, 这是因为激子修正 (excitonic correction) 为零而退极化移动是一个正值。在 TDLDA 下, 激子修正部分地抵消了退极化移动, 因而 ω_{10} 比 RPA 情形下更靠近 (1-0) 单粒子激发区。电子密度约为 $8.14 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 时, ω_{10} 的能量与相应的能级差相同, 此时激子修正正好抵消了退极化移动, ω_{10} 完全位于 (1-0) 单粒子激发区内部。当电子密度再进一步降低时, 激子修正在数值上将超过退极化移动, ω_{10} 移到了 (1-0) 单粒子激发区的下面, 如图 3.4.3(c) 所示。

最后就不对称 DQW 结构中集体激发的实验观测问题说几句。本节的一个重要结果是, 当不对称程度足够大时, 原本阻尼的 ω_- 变成了无阻尼的, 与子带内的“光学模” ω_+ 和带间模 ω_{10} 共存。为了探讨通过非弹性光散射实验观测这些与不对称效应有关的现象的可能性, 我们计算了不对称 DQW 结构中集体激发的光谱权重。作为例子, 图 3.4.4 给出了波矢 q 取不同值、 $q_z = 4.2 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ 时 $W_1 = 175 \text{ \AA}$, $W_2 = 150 \text{ \AA}$, $b = 40 \text{ \AA}$, $n_{2D} = 3.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 的不对称 DQW 结构中集体激发的光谱权重。这里最重要的信息是三支模都有一定的光谱权重。实验上, ω_+ 和 ω_{10} 已

经在对称的 DQW 结构中被观测到了。因而，我们相信 ω_- 应该也能通过低温下的非弹性光散射实验观测到。

3.4.4. 结论

我们详细地研究了不对称效应对 DQW 结构中等离激元的影响。当逐渐增加两阱宽度之间的差别或垒宽时， ω_- 移出了 (0-0) 单粒子激发区而 ω_{10} 逐渐向 (0-1) 单粒子激发区靠拢并最终被阻尼掉。在适当的条件下，这两支模与无阻尼的带内模 ω_+ 可以共存。结果表明，随着电子密度的降低，交换-关联效应变得非常重要。我们还计算了激发谱的光谱权重，发现在适当的条件下，三支模都有一定的光谱权重，应该能在非弹性光散射实验中被观测到。

第四章 超晶格中等离激元的介电函数矩阵理论

在过去的几十年中,低维结构中的等离子激元已被深入研究过了。Stern [133] 首先考虑了 2DEG 中的等离子激元,在 SCF 近似下计算了二维电子层的动态极化率,发现二维等离子激元的频率 $\omega \sim \sqrt{q}$, 其中 q 为平面内的波矢。多层系统的等离子激元也已被很多作者考虑过了。Visscher 和 Falicov [134] 在 RPA 下讨论了周期排列的层状电子气体的静态介电函数。利用流体动力学模型, Fetter [135] 导出了确定无限多层电子气体结构中等离激元的方程。应用运动方程方法, Apostol [136] 也作了类似的分析,导出了等离子激元的色散关系。利用多体理论方法, Bloss 和 Brody [63] 研究了半导体超晶格中的等离子激元,计入了与声子的相互作用和磁场效应。Das Sarma 和 Quinn [62] 深入研究了第一类和第二类超晶格中的等离子激元,讨论了强耦合 ($qa \ll 1$) 和弱耦合 ($qa \gg 1$) 两种情形下等离子激元的色散关系。Tselis 和 Quinn [71] 将 Das Sarma 等人的结果推广到了多个子带被占据的情形,计算了子带内和子带间的等离子激元模。Yu 等人 [137] 研究了强隧穿和弱隧穿时量子阱超晶格中的等离子激元,讨论了电子气从三维系统向二维系统过渡时集体激发特性的变化。

在到目前为止的研究中,电子气体对外界微扰的响应都是用介电函数的张量来表示的,我们称之为介电函数张量理论。在本章中,我们推导等离子激元介电函数矩阵理论的一般表达式,建立两种理论之间的表象变换关系。将介电函数矩阵理论应用到量子阱超晶格中,分别在单电子哈密顿量的本征矢空间和傅里叶空间中导出了确定等离子激元的三组方程,研究了不同隧穿强度下等离子激元的性质。

§ 4.1 电子气系统中等离子激元的介电函数矩阵理论

在 § 2.1 中,我们曾经导出

$$V_{\alpha\beta}^{in} = \sum_{\mu\nu} U_{\alpha\beta,\mu\nu} \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} V_{\nu\mu} \quad (4.1.1)$$

对上式两边同时作运算 $\sum_{\beta} \int d\mathbf{r} \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r})$, 可得

$$\begin{aligned} \text{左边} &= \sum_{\beta} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}') V^{in}(\mathbf{r}') \varphi_{\beta}(\mathbf{r}') \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} V^{in}(\mathbf{r}) \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \stackrel{\text{记为}}{=} V_{\alpha}^{in} \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

利用

$$\begin{aligned} &\sum_{\beta} \int d\mathbf{r}'' \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r}'') U_{\alpha\beta,\mu\nu} \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\nu}(\mathbf{r}') \sum_{\beta} \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r}'') \varphi_{\beta}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\nu}(\mathbf{r}') \stackrel{\text{记为}}{=} U_{\alpha,\mu\nu} \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

和

$$\begin{aligned} V_{\nu\mu} &= \int d\mathbf{r} \varphi_{\nu}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \varphi_{\mu}(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_{\nu}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\mu}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_{\nu}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\mu}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}) \sum_{\beta} \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\beta}(\mathbf{r}') \\ &= \sum_{\beta} \int d\mathbf{r}' \varphi_{\beta}(\mathbf{r}') \varphi_{\mu}(\mathbf{r}') \varphi_{\nu}^*(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \varphi_{\beta}^*(\mathbf{r}) \\ &\stackrel{\text{记为}}{=} \sum_{\beta} G_{\beta,\mu\nu} V_{\beta} \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

得

$$\text{右边} = \sum_{\beta} \sum_{\mu\nu} U_{\alpha,\mu\nu} G_{\beta,\mu\nu} \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} V_{\beta} \quad (4.1.5)$$

所以

$$\begin{aligned} V_{\alpha}^{ex} &= V_{\alpha} - V_{\alpha}^{in} \\ &= \sum_{\beta} \left[\delta_{\alpha\beta} - \sum_{\mu\nu} U_{\alpha,\mu\nu} G_{\beta,\mu\nu} \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} \right] V_{\beta} \end{aligned} \quad (4.1.6)$$

由此得到在单电子哈密顿量的本征矢空间中电子气体的介电函数矩阵为

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \sum_{\mu\nu} U_{\alpha,\mu\nu} G_{\beta,\mu\nu} \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} \quad (4.1.7)$$

§ 4.2 傅里叶空间中电子气系统的响应方程

在本节中，我们用多体理论方法在傅里叶空间中推导电子气系统的响应方程。设无微扰时单电子的哈密顿量为 $\hat{H}_0$ ，其本征值和本征波函数分别为 E_α 和 $|\alpha\rangle = \varphi_\alpha(\mathbf{r})$ 。若不考虑介质的介电函数失配效应，则电子之间的相互作用势能具有

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (4.2.1)$$

的形式。于是可将 $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 在傅里叶空间（动量算符的本征矢空间）中展开，即以 $\{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\}$ 为基底展开

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad (4.2.2)$$

定义场算符

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha} \hat{C}_{\alpha} \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}) \\ \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha} \hat{C}_{\alpha}^+ \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

根据二次量子化的理论得系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} \hat{C}_{\alpha}^+ \hat{C}_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mu\nu} U_{\alpha\beta,\mu\nu} \hat{C}_{\alpha}^+ \hat{C}_{\mu}^+ \hat{C}_{\nu} \hat{C}_{\beta} \quad (4.2.4)$$

电子密度算符为

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(\mathbf{r}) &= \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \hat{C}_{\alpha}^+ \hat{C}_{\beta} \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\beta}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

将 $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ 在傅里叶空间中展开得

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.2.6)$$

其中的 Fourier 分量为

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \hat{C}_{\alpha}^+ \hat{C}_{\beta} \quad (4.2.7)$$

式中

$$e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \varphi_{\beta}(\mathbf{r}) \quad (4.2.8)$$

利用 (4.2.2) 式和 (4.2.7) 式，(4.2.4) 式可简化为

$$\hat{H} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} \hat{C}_{\alpha}^+ \hat{C}_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (\hat{\rho}_{\mathbf{q}}^+ \hat{\rho}_{\mathbf{q}} - N) U(\mathbf{q}) \quad (4.2.9)$$

为了考察电子气体对外界的响应，我们在原点引入一个以频率 ω 振荡的试探电荷，则外界微扰哈密顿量为

$$\begin{aligned}\hat{H}_e(t) &= \sum_{\alpha\beta} \hat{C}_\alpha^+ \hat{C}_\beta \int d\mathbf{r} \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) V^{ex}(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) e^{-i\omega t + \eta t} \\ &= \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{ex} \sum_{\alpha\beta} e_{\beta\alpha}^+(\mathbf{q}) \hat{C}_\alpha^+ \hat{C}_\beta e^{-i\omega t + \eta t} \\ &= \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{ex}(t) \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^+\end{aligned}\quad (4.2.10)$$

其中

$$V_{\mathbf{q}}^{ex}(t) = V_{\mathbf{q}}^{ex} e^{-i\omega t + \eta t} \quad (4.2.11)$$

系统总的哈密顿量为

$$\hat{H}_{\text{总}} = \hat{H} + \hat{H}_e(t) \quad (4.2.12)$$

定义电子-空穴对的湮灭算符和产生算符

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) &= \hat{C}_\alpha^+ \hat{C}_\beta e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \\ \hat{\rho}_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}) &= \hat{C}_\beta^+ \hat{C}_\alpha e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q})\end{aligned}\quad (4.2.13)$$

则

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{\mathbf{q}} &= \sum_{\alpha\beta} \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \\ \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^+ &= \sum_{\alpha\beta} \hat{\rho}_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q})\end{aligned}\quad (4.2.14)$$

考察 $\hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ 的 Heisenberg 运动方程

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = [\hat{H}_{\text{总}}, \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q})] \quad (4.2.15)$$

对易子

$$\begin{aligned}[\hat{\rho}_{\mathbf{q}'}^+, \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q})] &= \sum_{\mu\nu} e_{\mu\nu}^+(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) [\hat{C}_\nu^+ \hat{C}_\mu, \hat{C}_\alpha^+ \hat{C}_\beta] \\ &= \sum_{\nu} e_{\alpha\nu}^+(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \hat{C}_\nu^+ \hat{C}_\beta - \sum_{\mu} e_{\mu\beta}^+(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \hat{C}_\alpha^+ \hat{C}_\mu\end{aligned}\quad (4.2.16)$$

作无规相近似得

$$[\hat{\rho}_{\mathbf{q}'}^+, \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q})] = (f_\beta - f_\alpha) e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \quad (4.2.17)$$

根据式 (4.2.4)、(4.2.10)、(4.2.12) 和 (4.2.17) 得

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}_{\text{总}}, \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \right] &= (E_{\alpha} - E_{\beta}) \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \\ &+ \sum_{\mathbf{q}'} (f_{\beta} - f_{\alpha}) e_{\alpha\beta}^{+}(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) [U(\mathbf{q}') \hat{\rho}_{\mathbf{q}'} + V_{\mathbf{q}'}^{\text{ex}}(t)] \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

根据线性响应理论

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \rangle_t = (\omega + i\eta) \langle \hat{\rho}_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \rangle_t \quad (4.2.19)$$

和 (4.2.14) 式、(4.2.18) 式得

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle_t = \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}'} \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} e_{\alpha\beta}^{+}(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) [U(\mathbf{q}') \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}'} \rangle_t + V_{\mathbf{q}'}^{\text{ex}}(t)] \quad (4.2.20)$$

粒子数密度起伏引起的势能为

$$V^{\text{in}}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}') \rangle_t \quad (4.2.21)$$

其 Fourier 分量为

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{q}}^{\text{in}}(t) &= \int d\mathbf{r} V^{\text{in}}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \sum_{\mathbf{q}'} U(\mathbf{q}') e^{i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \sum_{\mathbf{q}''} \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}''} \rangle_t e^{i\mathbf{q}'' \cdot \mathbf{r}'} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \\ &= U(\mathbf{q}) \langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle_t \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

(4.2.20) 式变为

$$\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}} \rangle_t = \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}'} \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} e_{\alpha\beta}^{+}(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) V_{\mathbf{q}'}(t) \quad (4.2.23)$$

故可得

$$V_{\mathbf{q}}^{\text{in}}(t) = \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}'} U(\mathbf{q}) \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} e_{\alpha\beta}^{+}(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) V_{\mathbf{q}'}(t) \quad (4.2.24)$$

$$V_{\mathbf{q}}^{\text{ex}}(t) = \sum_{\mathbf{q}'} \left[\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - U(\mathbf{q}) \sum_{\alpha\beta} \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} e_{\alpha\beta}^{+}(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \right] V_{\mathbf{q}'}(t) \quad (4.2.25)$$

因而傅里叶空间中的介电函数为

$$\epsilon_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - U(\mathbf{q}) \sum_{\alpha\beta} \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} e_{\alpha\beta}^{+}(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \quad (4.2.26)$$

§ 4.3 三种表象之间的变换关系

4.3.1. 三种表象中电子气体的响应方程

前面我们已经分别在单电子哈密顿量 $\hat{H}_0$ 的并矢空间、 $\hat{H}_0$ 的本征矢空间和傅里叶空间中导出了电子气体对外界微扰的响应，为了讨论的方便，将三种表象中电子气体的响应方程重新整理如下。

(I) 单电子哈密顿量的并矢空间 $\{\varphi_\alpha(\mathbf{r})\varphi_\beta^*(\mathbf{r})\}$ 中

$$V_{\alpha\beta}^{ex} = \sum_{\mu\nu} \left(\delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu} - U_{\alpha\beta,\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \right) V_{\nu\mu} \quad (4.3.1)$$

其中

$$V_{\alpha\beta} = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) \quad (4.3.2)$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} \varphi_\alpha(\mathbf{r}) \varphi_\beta^*(\mathbf{r}) \quad (4.3.3)$$

$$U_{\alpha\beta,\mu\nu} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_\mu^*(\mathbf{r}') \varphi_\nu(\mathbf{r}') \quad (4.3.4)$$

(II) 单电子哈密顿量的本征矢空间 $\{\varphi_\alpha(\mathbf{r})\}$ 中

$$V_\alpha^{ex} = \sum_\beta \left[\delta_{\alpha\beta} - \sum_{\mu\nu} U_{\alpha,\mu\nu} G_{\beta,\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \right] V_\beta \quad (4.3.5)$$

其中

$$V_\alpha = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \quad V(\mathbf{r}) = \sum_\alpha V_\alpha \varphi_\alpha(\mathbf{r}) \quad (4.3.6)$$

$$U_{\alpha,\mu\nu} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_\mu^*(\mathbf{r}') \varphi_\nu(\mathbf{r}') \quad (4.3.7)$$

$$G_{\beta,\mu\nu} = \int d\mathbf{r} \varphi_\beta(\mathbf{r}) \varphi_\mu(\mathbf{r}) \varphi_\nu^*(\mathbf{r}) \quad (4.3.8)$$

(III) 傅里叶空间 $\{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\}$ 中

$$V_{\mathbf{q}}^{ex}(t) = \sum_{\mathbf{q}'} \left[\delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - U(\mathbf{q}) \sum_{\alpha\beta} \frac{f_\alpha - f_\beta}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\alpha - E_\beta} e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \right] V_{\mathbf{q}'}(t) \quad (4.3.9)$$

其中

$$V_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.3.10)$$

$$e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \langle \alpha | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \beta \rangle = \int d\mathbf{r} \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \varphi_\beta(\mathbf{r}) \quad (4.3.11)$$

4.3.2. 三种表象之间的变换关系

通过下列三组基矢间的变换可以将响应方程从一个希尔伯特空间变换到另一个希尔伯特空间，即从一个表象变换到另外一个表象。

1. $\hat{H}_0$ 的并矢空间 $\rightarrow \hat{H}_0$ 的本征矢空间 (I $\rightarrow$ II)

根据 § 4.1 中的推导可知两种表象之间的变换关系为

$$V_\alpha = \sum_\beta V_{\alpha\beta} g_\beta \quad g_\beta = \int d\mathbf{r} \varphi_\beta^*(\mathbf{r}) \quad (4.3.12)$$

$$V_{\alpha\beta} = \sum_\nu V_\nu g_{\nu,\beta\alpha} \quad g_{\nu,\beta\alpha} = \int d\mathbf{r} \varphi_\nu(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \quad (4.3.13)$$

2. 傅里叶空间 $\rightarrow \hat{H}_0$ 的并矢空间 (III $\rightarrow$ I)

两种表象之间的变换关系为

$$V_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \quad V_{\mathbf{q}} = \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}^*(\mathbf{q}) \quad (4.3.14)$$

其中

$$g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) \quad (4.3.15)$$

[证明]: 在傅里叶空间中

$$V_{\mathbf{q}}^{in} = \sum_{\mathbf{q}'} U(\mathbf{q}) \sum_{\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} e_{\mu\nu}^+(\mathbf{q}') e_{\mu\nu}(\mathbf{q}) V_{\mathbf{q}'} \quad (4.3.16)$$

两边作运算 $\sum_{\mathbf{q}} g_{\alpha\beta}(\mathbf{q})$, 得

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}^{in} &= \sum_{\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \int d\mathbf{r}' \sum_{\mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}'} \varphi_\mu(\mathbf{r}') \varphi_\nu^*(\mathbf{r}') \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}'' \sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')} \varphi_\mu^*(\mathbf{r}'') \varphi_\nu(\mathbf{r}'') \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r}') \varphi_\mu(\mathbf{r}') \varphi_\nu^*(\mathbf{r}') \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}'' \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \varphi_\beta(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \varphi_\mu^*(\mathbf{r}'') \varphi_\nu(\mathbf{r}'') \\ &= \sum_{\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} U_{\alpha\beta,\mu\nu} V_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (4.3.17)$$

由 $V_{\alpha\beta}^{ex} = V_{\alpha\beta} - V_{\alpha\beta}^{in}$ 即可得 (4.3.1) 式。

3. 傅里叶空间 $\rightarrow \hat{H}_0$ 的本征矢空间 (III $\rightarrow$ II)

用类似的方法可以证明，傅里叶空间和本征矢空间之间的变换关系为

$$V_\alpha = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} g_\alpha(\mathbf{q}), \quad V_{\mathbf{q}} = \sum_{\alpha} V_\alpha g_\alpha^*(\mathbf{q}) \quad (4.3.18)$$

其中

$$g_\alpha(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) \quad (4.3.19)$$

§ 4.4 周期调制系统中电子气的响应方程

4.4.1. $\hat{H}_0$ 的本征矢空间中

根据 § 4.1 中的结果，在 $\hat{H}_0$ 的本征矢空间中，电子气体的介电函数矩阵为

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \sum_{\mu\nu} U_{\alpha,\mu\nu} G_{\beta,\mu\nu} \frac{f_\mu - f_\nu}{(\hbar\omega + i\eta) + E_\mu - E_\nu} \quad (4.4.1)$$

其中

$$\begin{aligned} U_{\alpha,\mu\nu} &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_\mu^*(\mathbf{r}') \varphi_\nu(\mathbf{r}') \\ G_{\beta,\mu\nu} &= \int d\mathbf{r}' \varphi_\beta(\mathbf{r}') \varphi_\mu(\mathbf{r}') \varphi_\nu^*(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

对于二维或三维的布洛赫电子气体，可取

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= |l, \mathbf{q}\rangle = u_l(\mathbf{q}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ |\beta\rangle &= |l', \mathbf{q}'\rangle = u_{l'}(\mathbf{q}', \mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}} \\ |\mu\rangle &= |n, \mathbf{k}\rangle = u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ |\nu\rangle &= |n', \mathbf{k}'\rangle = u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (4.4.3)$$

其中 $\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{k}, \mathbf{k}'$ 位于第一布里渊区内。于是

$$\begin{aligned} U_{\alpha,\mu\nu} &= \sum_{\mathbf{q}''} U(\mathbf{q}'') \int d\mathbf{r} u_l^*(\mathbf{q}, \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}'')\cdot\mathbf{r}} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r}' u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}') u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q}''-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

第一个积分只有当 $\mathbf{q}$ 与 $\mathbf{q}''$ 相差一倒格矢，即满足 $\mathbf{q}'' = \mathbf{q} + \mathbf{G}_m$ 时才不为零，第二个积分只有当 $\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{k}' = \mathbf{K}$ ($\mathbf{K}$ 为某一倒格矢) 时才不为零。故

$$\begin{aligned} U_{\alpha,\mu\nu} &= \sum_{\mathbf{G}_m} U(\mathbf{q} + \mathbf{G}_m) \int d\mathbf{r} u_l^*(\mathbf{q}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}_m\cdot\mathbf{r}} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r}' u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}') u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{K}+\mathbf{G}_m)\cdot\mathbf{r}'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{k}', \mathbf{K}} \end{aligned} \quad (4.4.5)$$

类似地,

$$G_{\beta,\mu\nu} = \int d\mathbf{r} u_{\nu'}^*(\mathbf{q}', \mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{q}'+\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{K}'} \quad (4.4.6)$$

要使 $U_{\alpha,\mu\nu}$ 和 $G_{\beta,\mu\nu}$ 同时不为零, 需满足

$$\begin{cases} \mathbf{q}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K}' \\ \mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K} \end{cases} \quad (4.4.7)$$

考虑到 $\mathbf{q}'$ 和 $\mathbf{q}$ 位于第一布里渊区内, 可知 $\mathbf{q}' = \mathbf{q}$ 和 $\mathbf{K}' = \mathbf{K}$ 。(4.4.1) 式变为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ll'}(\omega) &= \delta_{ll'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} - \sum_{nn'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k}')}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}')} \\ &\quad \times \sum_{\mathbf{G}_m} U(\mathbf{q} + \mathbf{G}_m) \int d\mathbf{r} u_l^*(\mathbf{q}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}_m \cdot \mathbf{r}} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{K} + \mathbf{G}_m) \cdot \mathbf{r}} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_{l'}(\mathbf{q}', \mathbf{r}) u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}^*(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \\ &\quad \times \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{k}-\mathbf{k}', \mathbf{K}} \delta_{\mathbf{q}', \mathbf{q}} \end{aligned} \quad (4.4.8)$$

利用

$$u_n(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{r}) = u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (4.4.9)$$

可得

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ll'}(\mathbf{q}, \omega) &= \delta_{ll'} - \sum_{nn'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\ &\quad \times \sum_{\mathbf{G}_m} U(\mathbf{q} + \mathbf{G}_m) \int d\mathbf{r} u_l^*(\mathbf{q} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}) \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r}) \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_{l'}(\mathbf{q}, \mathbf{r}) u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

4.4.2. 傅里叶空间中

在 § 4.2 中, 我们得到

$$V_q^{in}(t) = \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{q}'} U(\mathbf{q}) \frac{f_{\alpha} - f_{\beta}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\alpha} - E_{\beta}} e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}') e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) V_{\mathbf{q}'}(t) \quad (4.4.11)$$

对二维或三维的布洛赫电子气体, 可取

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= |n, \mathbf{k}\rangle = u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ |\beta\rangle &= |n', \mathbf{k}'\rangle = u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (4.4.12)$$

其中 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}'$ 位于第一布里渊区内。将上式应用到 $e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}')$ 的表达式中，得

$$e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}') = \int d\mathbf{r} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}^*(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}} \quad (4.4.13)$$

令 $\mathbf{q}' = \mathbf{q}_b' + \mathbf{G}_b'$ ，其中 $\mathbf{q}_b'$ 位于第一布里渊区内， $\mathbf{G}_b'$ 是倒格矢，则 (4.4.13) 式可写为

$$e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}') = \int d\mathbf{r} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}^*(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{K}' - \mathbf{G}_b') \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}_b', \mathbf{K}'} \quad (4.4.14)$$

其中 $\mathbf{K}'$ 为一倒格矢。同样地，

$$\begin{aligned} e_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{G}_b) \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}_b, \mathbf{K}} \end{aligned} \quad (4.4.15)$$

在上式中我们假设 $\mathbf{q} = \mathbf{q}_b + \mathbf{G}_b$ ，其中 $\mathbf{q}_b$ 位于第一布里渊区内， $\mathbf{G}_b$ 是倒格矢。要使 $e_{\alpha\beta}^+(\mathbf{q}')$ 和 $e_{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ 同时不为零，需满足

$$\begin{cases} \mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}_b' = \mathbf{K}' \\ \mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}_b = \mathbf{K} \end{cases} \quad (4.4.16)$$

可得

$$\mathbf{q}_b = \mathbf{q}_b' \quad \mathbf{K}' = \mathbf{K} \quad (4.4.17)$$

所以

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{q}_b + \mathbf{G}_b}^{in} &= \sum_{\mathbf{q}'} U(\mathbf{q}) \sum_{nn'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k}')}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}')} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}^*(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{K} - \mathbf{G}_b') \cdot \mathbf{r}} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{G}_b) \cdot \mathbf{r}} \\ &\quad \times V_{\mathbf{q}_b' + \mathbf{G}_b'} \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}_b, \mathbf{K}} \delta_{\mathbf{q}_b, \mathbf{q}_b'} \\ &= \sum_{\mathbf{G}_b'} U(\mathbf{q}_b + \mathbf{G}_b) V_{\mathbf{q}_b + \mathbf{G}_b'} \\ &\quad \times \sum_{nn'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_b + \mathbf{K})}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_b + \mathbf{K})} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}_b, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}_b' \cdot \mathbf{r}} \\ &\quad \times \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}_b, \mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}_b \cdot \mathbf{r}} \end{aligned} \quad (4.4.18)$$

将 $\mathbf{G}_b$ 、 $\mathbf{G}'_b$ 和 $\mathbf{q}_b$ 的下标略去, 可得电子气体的介电函数矩阵为

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\mathbf{G},\mathbf{G}'}(\mathbf{q},\omega) &= \delta_{\mathbf{G},\mathbf{G}'} - U(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \sum_{nn'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \\ &\times \int d\mathbf{r} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}' \cdot \mathbf{r}} \\ &\times \int d\mathbf{r} u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}\quad (4.4.19)$$

§ 4.5 量子阱超晶格中电子气的响应

4.5.1. $\hat{H}_0$ 的本征矢空间中 (一)

将 § 4.4 中的方程 (4.4.10) 应用到量子阱超晶格中, 由于电子在垂直于超晶格方向的运动是自由的, 故有 $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_{\parallel}, q_z)$, $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$, $\mathbf{G}_m = (0, 0, G_z)$, 其中 $G_z = m \frac{2\pi}{d}$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), 因而

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ll'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, q_z) &= \delta_{ll'} - \sum_{k_z} \sum_{G_z} U(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z + G_z) \\ &\times \sum_{nn'} \Pi_{nn'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, k_z, k_z + q_z) I_l(q_z + G_z) \\ &\times I_{nn'}(k_z, k_z + q_z + G_z) I_{l',nn'}(q_z, k_z, k_z + q_z)\end{aligned}\quad (4.5.1)$$

其中

$$U(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z + G_z) = \frac{1}{d} \frac{e^2}{\epsilon_r \epsilon_0} \frac{1}{q_{\parallel}^2 + (q_z + G_z)^2} \quad (4.5.2)$$

$$\Pi_{nn'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, k_z, k_z + q_z) = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \frac{f_n(k_z, \mathbf{k}_{\parallel}) - f_{n'}(k_z + q_z, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel})}{(\hbar\omega + i\eta) + E_n(k_z, \mathbf{k}_{\parallel}) - E_{n'}(k_z + q_z, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel})} \quad (4.5.3)$$

$$I_l(q_z + G_z) = \int dz u_l^*(q_z + G_z, z) \quad (4.5.4)$$

$$I_{nn'}(k_z, k_z + q_z + G_z) = \int dz u_n^*(k_z, z) u_{n'}(k_z + q_z + G_z, z) \quad (4.5.5)$$

$$I_{l',nn'}(q_z, k_z, k_z + q_z) = \int dz u_{l'}(q_z, z) u_n(k_z, z) u_{n'}^*(k_z + q_z, z) \quad (4.5.6)$$

在上面各式的积分中, 波函数是在整个超晶格长度上归一化的, 将波函数改为在一个周期 $\left[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right]$ 内归一化, 并利用

$$u_n(k_z, z) = \varphi_{n,k_z}(z) e^{-ik_z z} \quad (4.5.7)$$

可得

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ll'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, q_z) = & \delta_{ll'} - \frac{d}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dk_z \sum_{nn'} \sum_{G_z} U(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z + G_z) \\ & \times \Pi_{nn'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, k_z, k_z + q_z) I_l(q_z + G_z) \\ & \times I_{nn'}(k_z, k_z + q_z, q_z + G_z) \\ & \times I_{l',nn'}(q_z, k_z, q_z + k_z)\end{aligned}\quad (4.5.8)$$

其中 I_l 、 $I_{nn'}$ 和 $I_{l',nn'}$ 被重新定义为

$$I_l(q_z + G_z) = \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dz \varphi_{l,q_z}(z) e^{i(q_z + G_z)z} \quad (4.5.9)$$

$$I_{nn'}(k_z, k_z + q_z, q_z + G_z) = \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dz \varphi_{n,k_z}^*(z) \varphi_{n',k_z+q_z}(z) e^{-i(q_z + G_z)z} \quad (4.5.10)$$

$$I_{l',nn'}(q_z, k_z, q_z + k_z) = \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dz \varphi_{l',q_z}(z) \varphi_{n,k_z}(z) \varphi_{n',q_z+k_z}^*(z) \quad (4.5.11)$$

4.5.2. $\hat{H}_0$ 的本征矢空间中 (二)

在 § 4.1 中, 我们得到

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - \sum_{\mu\nu} U_{\alpha,\mu\nu} G_{\beta,\mu\nu} \frac{f_{\mu} - f_{\nu}}{(\hbar\omega + i\eta) + E_{\mu} - E_{\nu}} \quad (4.5.12)$$

其中

$$U_{\alpha,\mu\nu} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varphi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{\mu}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\nu}(\mathbf{r}') \quad (4.5.13)$$

$$G_{\beta,\mu\nu} = \int d\mathbf{r}' \varphi_{\beta}(\mathbf{r}') \varphi_{\mu}(\mathbf{r}') \varphi_{\nu}^*(\mathbf{r}') \quad (4.5.14)$$

超晶格中的波函数可取为

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle &= \varphi_{l,q_z}(z) e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \rho} \\ |\beta\rangle &= \varphi_{l',q'_z}(z) e^{i\mathbf{q}'_{\parallel} \cdot \rho} \\ |\mu\rangle &= \varphi_{n,k_z}(z) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \rho} \\ |\nu\rangle &= \varphi_{n',k'_z}(z) e^{i\mathbf{k}'_{\parallel} \cdot \rho}\end{aligned}\quad (4.5.15)$$

利用这些波函数和 $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 在平面内的 Fourier 展开

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{q}''} \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{q}''} e^{-q''|z-z'|} e^{i\mathbf{q}'' \cdot (\rho - \rho')} \quad (4.5.16)$$

得

$$\begin{aligned}
U_{\alpha,\mu\nu} &= \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}''} \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{q}_{\parallel}''} \int dz dz' \varphi_{l,q_z}^*(z) e^{-q_{\parallel}''|z-z'|} \\
&\quad \times \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z'}(z') \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}''} \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}'+\mathbf{q}_{\parallel}''} \\
&= \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{q}_{\parallel}} \int dz dz' \varphi_{l,q_z}^*(z) e^{-q_{\parallel}|z-z'|} \\
&\quad \times \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z'}(z') \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}'+\mathbf{q}_{\parallel}}
\end{aligned} \quad (4.5.17)$$

$$G_{\beta,\mu\nu} = \int dz \varphi_{l',q_z'}(z) \varphi_{n,k_z}(z) \varphi_{n',k_z'}^*(z) \delta_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}'+\mathbf{q}_{\parallel}} \quad (4.5.18)$$

只有当 $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{q}_{\parallel}'$ 时 $U_{\alpha,\mu\nu}$ 和 $G_{\beta,\mu\nu}$ 才同时不为零。故 (4.5.12) 可化为

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{ll'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, q_z, q_z') &= \delta_{ll'} \delta_{q_z, q_z'} - \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{q}_{\parallel}} \sum_{nn'} \sum_{k_z, k_z'} \Pi_{nn'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, k_z, k_z') \\
&\quad \times I_{l,nn'}(q_z, k_z, k_z', \mathbf{q}_{\parallel}) G_{l',nn'}(q_z', k_z, k_z')
\end{aligned} \quad (4.5.19)$$

其中

$$I_{l,nn'}(q_z, k_z, k_z', \mathbf{q}_{\parallel}) = \int dz dz' \varphi_{l,q_z}^*(z) e^{-q_{\parallel}|z-z'|} \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z'}(z') \quad (4.5.20)$$

$$G_{l',nn'}(q_z', k_z, k_z') = \int dz \varphi_{l',q_z'}(z) \varphi_{n,k_z}(z) \varphi_{n',k_z'}^*(z) \quad (4.5.21)$$

(4.5.20) 和 (4.5.21) 两式中的积分是在超晶格方向的总长度上进行的, 下面将它们化为一个周期 $\left[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right]$ 内的积分。利用

$$\varphi_{l,k_z}(z+md) = \varphi_{l,k_z}(z) e^{imk_z d} \quad (4.5.22)$$

得

$$G_{l',nn'}(q_z', k_z, k_z') = N \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz \varphi_{l',q_z'}(z) \varphi_{n,k_z}(z) \varphi_{n',k_z'}^*(z) \delta_{k_z', k_z+q_z'} \quad (4.5.23)$$

$$\begin{aligned}
I_{l,nn'}(q_z, k_z, k_z', \mathbf{q}_{\parallel}) &= \sum_{mm'} e^{-imq_z d} e^{-im'(k_z-k_z')d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz dz' \varphi_{l,q_z}^*(z) \\
&\quad \times e^{-q_{\parallel}|z-z'+(m-m')d|} \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z'}(z') \\
&= N \sum_J e^{-iJq_z d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz dz' e^{-q_{\parallel}|z-z'+Jd|} \\
&\quad \times \varphi_{l,q_z}^*(z) \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z'}(z') \delta_{k_z', k_z+q_z}
\end{aligned} \quad (4.5.24)$$

$G_{l',nn'}$ 和 $I_{l,nn'}$ 同时不为零的条件为 $k'_z = k_z + q_z$, $q'_z = q_z$ 。重新定义

$$G_{l',nn'}(q_z, k_z, k_z + q_z) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz \varphi_{l',q_z}(z) \varphi_{n,k_z}(z) \varphi_{n',k_z+q_z}^*(z) \quad (4.5.25)$$

$$I_{l,nn'}(q_z, k_z, k_z + q_z, \mathbf{q}_{\parallel}) = \sum_J e^{-iJq_z d} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz dz' e^{-q_{\parallel}|z-z'|+Jd} \\ \times \varphi_{l,q_z}^*(z) \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z+q_z}(z') \quad (4.5.26)$$

$I_{l,nn'}$ 还可以简化, 令

$$I_{l,nn'}^0 = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz dz' \varphi_{l,q_z}^*(z) e^{-q_{\parallel}|z-z'|} \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z+q_z}(z') \quad (4.5.27)$$

$$D_{l,nn'}(J) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz dz' \varphi_{l,q_z}^*(z) e^{-q_{\parallel}|z-z'|+Jd} \varphi_{n,k_z}^*(z') \varphi_{n',k_z+q_z}(z') \quad (4.5.28)$$

则

$$I_{l,nn'} = I_{l,nn'}^0 + \sum_{J=1}^{\infty} e^{-iJq_z d} D_{l,nn'}(J) + \sum_{J=1}^{\infty} e^{iJq_z d} D_{l,nn'}(-J) \quad (4.5.29)$$

而当 $J \geq 1$ 时,

$$D_{l,nn'}(J) = e^{-q_{\parallel} J d} I_l(q_{\parallel}, q_z) I_{nn'}(q_{\parallel}, k_z, k_z + q_z) \quad (4.5.30)$$

其中

$$I_l(q_{\parallel}, q_z) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz \varphi_{l,q_z}^*(z) e^{-q_{\parallel} z} \quad (4.5.31)$$

$$I_{nn'}(q_{\parallel}, k_z, k_z + q_z) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz \varphi_{n,k_z}^*(z) \varphi_{n',k_z+q_z}(z) e^{q_{\parallel} z} \quad (4.5.32)$$

所以

$$I_{l,nn'}(q_{\parallel}, q_z, k_z) = I_{l,nn'}^0 + S(q_{\parallel}, q_z) I_l(q_{\parallel}, q_z) I_{nn'}(q_{\parallel}, k_z, k_z + q_z) \\ + S(q_{\parallel}, -q_z) I_l(-q_{\parallel}, q_z) I_{nn'}(-q_{\parallel}, k_z, k_z + q_z) \quad (4.5.33)$$

其中

$$S(q_{\parallel}, q_z) = \frac{1}{e^{(q_{\parallel} + i q_z) d} - 1} \quad (4.5.34)$$

最后可得超晶格的介电函数矩阵为

$$\epsilon_{ll'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, q_z) = \delta_{ll'} - \frac{e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 q_{\parallel}} - \frac{d}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk_z \sum_{nn'} \Pi_{nn'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, k_z, k_z + q_z) \\ \times I_{l,nn'}(q_{\parallel}, q_z, k_z) G_{l',nn'}(q_z, k_z, q_z + k_z) \quad (4.5.35)$$

4.5.3. 傅里叶空间中

将 (4.4.19) 式应用到量子阱超晶格系统, 令 $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_{\parallel}, q_z)$, $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$, $\mathbf{G} = (0, 0, G_z)$, $\mathbf{G}' = (0, 0, G'_z)$, 得

$$\begin{aligned} \varepsilon_{G_z, G'_z}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, q_z) &= \delta_{G_z, G'_z} - U(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z + G_z) \sum_{nn'} \sum_{k_z} \Pi_{nn'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, k_z, k_z + q_z) \\ &\quad \times \int dz u_n^*(k_z, z) u_{n'}(k_z + q_z, z) e^{-iG_z z} \\ &\quad \times \int dz u_n(k_z, z) u_{n'}^*(k_z + q_z, z) e^{iG'_z z} \end{aligned} \quad (4.5.36)$$

将波函数在一个周期 $\left[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right]$ 内归一化, 并利用

$$u_n(k_z, z) = \varphi_{n, k_z}(z) e^{-ik_z z} \quad (4.5.37)$$

得

$$\begin{aligned} \varepsilon_{G_z, G'_z}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, q_z) &= \delta_{G_z, G'_z} - U(\mathbf{q}_{\parallel}, q_z + G_z) \\ &\quad \times \frac{d}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dk_z \sum_{nn'} \Pi_{nn'}(\mathbf{q}_{\parallel}, \omega, k_z, k_z + q_z) \\ &\quad \times I_{nn'}(k_z, k_z + q_z, q_z + G_z) \\ &\quad \times I_{nn'}^*(k_z, k_z + q_z, q_z + G'_z) \end{aligned} \quad (4.5.38)$$

其中

$$I_{nn'}(k_z, k_z + q_z, q_z + G_z) = \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dz \varphi_{n, k_z}^*(z) \varphi_{n', k_z + q_z}(z) e^{-i(q_z + G_z)z} \quad (4.5.39)$$

§ 4.6 阱间耦合对量子阱超晶格中等离激元的影响

考虑 $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 量子阱超晶格中等离激元的色散关系。忽略介电失配效应, 即假设阱层和垒层材料的介电常数相同, 将其取为 $\epsilon_r = 12.87$ 。取 GaAs 中电子的有效质量 $m_0^* = 0.067m_e$, 其中 m_e 为裸电子的质量。取 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中电子的有效质量 $m_b^* = m_0^* + 0.083m_e x$, 其中 x 为铝的含量。设 GaAs 和 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 中电子导带的带阶 (即垒高) 为 $V_b = 750x \text{ meV}$ ($0 \leq x \leq 0.45$) 或 $V_b = 750x + 690(x - 0.45)^2 \text{ meV}$ ($0.45 < x \leq 1$)。我们不失一般性地在计算中取 $x = 0.3$, 故 $m_b^* = 0.092m_e$, $V_b = 225 \text{ meV}$ 。

当垒的宽度 b 或势垒高度 V_b 很大时, 电子被局域在阱中, 相邻阱的波函数之间的交迭很小, 这就是所谓的孤立的量子阱系统。随垒宽或垒高的减小, 电子在各阱之间的隧穿增强, 系统即成为耦合的量子阱系统。

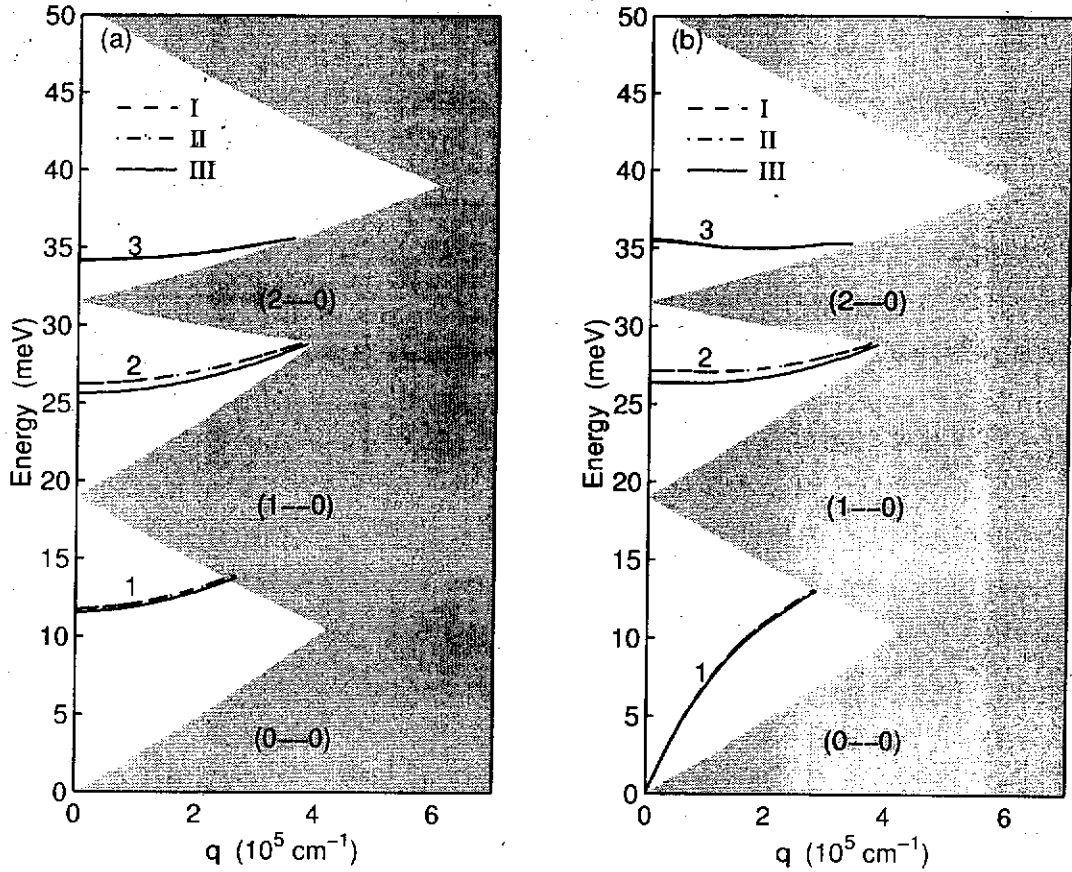


图 4.6.1 (a) $q_z = 0$ (b) $q_z = 0.4\pi/d$ 两种情形下垒宽 $b = 600 \text{ \AA}$ 时量子阱超晶格中等离激元的色散关系。 $a = 260 \text{ \AA}$, $n_s = 7.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。虚线、点划线和实线分别是根据 (4.5.8) 式、(4.5.35) 式和 (4.5.38) 式求得的结果，分别标记为“I”、“II”和“III”。阴影区域为单粒子激发区，三支集体激发模按能量由低到高的顺序标记为“1”、“2”和“3”。

首先考察垒宽很大时的孤立的量子阱系统，设阱宽 $a = 260 \text{ \AA}$ ，垒宽 $b = 600 \text{ \AA}$ ，每个量子阱中的二维电子密度 $n_s = 7.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ，电子占据两个子带，可以采用三子带模型进行计算。图 4.6.1 为 (a) $q_z = 0$ 和 (b) $q_z = 0.4\pi/d$ (其中 $d = a + b$ 为量子阱超晶格的周期) 时等离激元的色散关系，其中虚线、点划线和实线分别是根据 (4.5.8) 式、(4.5.35) 式和 (4.5.38) 式求得的结果，分别标记为“I”、“II”和“III”，其中“I”和“II”是 $\hat{H}_0$ 本征矢空间中的结果，“III”是傅里叶空间中的结果。在“I”和“III”计算中，我们取 11 个倒格矢，即 $G_z = 2m/\pi$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5$)。图中的阴影区域表示单粒子激发区，三支集体激发模按能量由低到高的顺序标记为“1”、“2”和“3”。结果表明， $\hat{H}_0$ 本征矢空间中的两组结果完全重合，在图中分辨不出来。对于傅里叶空间中的结果，可以看出，第一和第三支模几乎与 $\hat{H}_0$ 本征矢空间中的结果重合，第二支模稍有偏离，但偏差不超过 3%。从图 4.6.1(a) 可以看出，当 $q_z = 0$ 时有三支等离激元模，虽然从 (4.5.8)、(4.5.35) 和 (4.5.38) 式可以看出计算已包含了不同集体激发模之间的耦合，但仍可以把能量最低的一支指证为主

要与子带内的跃迁有关的集体激发，而能量较高的两支则是主要与子带间跃迁有关的集体激发。子带内的模类似于一支三维的等离子激元模，这是因为当 $q_z = 0$ 时，各层中的电子密度以同位相作振荡运动。Das Sarma 等人 [62] 忽略了波函数的扩展，将电子层处理为纯二维的，得到子带内的激发模在长波极限下的频率为

$$\omega(q \rightarrow 0) = \left(\frac{n_{eff} e^2}{\epsilon_r \epsilon_0 m_0^*} \right)^{1/2} \quad (4.6.1)$$

其中有效的三维电子密度 $n_{eff} = n_s/d$ 。(4.6.1) 式与三维体等离子激元在长波极限下频率的表达式形式完全相同。将图 4.6.1 中超晶格的参数代入 (4.6.1) 式可得 $\omega(q \rightarrow 0) = 11.51 \text{ meV}$ ，与我们的数值结果符合得很好。除了子带内的集体激发模外，还有两支子带间的集体激发模，分别位于 (1-0) 和 (2-0) 单粒子激发区上面，它们的色散曲线很平，在长波限下几乎与 q 无关，只是在 q 较大时才略有上升。当 $q_z \neq 0$ 时 [见图 4.6.1(b)]，系统的集体激发与 $q_z = 0$ 时有明显的不同。这时仍然有三支激发模，但带内集体激发模的长波能隙消失，变成了一支声学模，此时各层中的电子密度不再以同位相振荡。根据 Das Sarma 等人的结果 [62]， $q_z \neq 0$ 时子带内的激发模在长波下的色散可近似为

$$\omega \simeq \left(\frac{n_s e^2}{2\epsilon_r \epsilon_0 m_0^*} \right)^{1/2} \left[\frac{d}{1 - \cos(q_z d)} \right]^{1/2} q \quad (4.6.2)$$

显然 q_z 越大，相同 q 值下带内模的频率越低。从图 4.6.1(b) 还可以看出，与带内模的变化趋势相反，当 $q_z \neq 0$ 时，两支带间激发模的频率均比 $q_z = 0$ 时大。实际上，当 q_z 取遍第一布里渊区内的值时，系统的等离子激元色散曲线形成三个带，带内模色散带的上下沿分别对应 $q_z = 0$ 和 $q_z = \pi/d$ 的情形，带间模的上下沿则分别对应 $q_z = \pi/d$ 和 $q_z = 0$ 。

图 4.6.2 是垒宽为 $200 \text{ \AA}$ 时 $q_z = 0$ 和 $q_z = 0.4\pi/d$ 两种情形下等离子激元的色散关系，其它参数与图 4.6.1 相同。比较图 4.6.2 与图 4.6.1 可以发现，两幅图的基本特征很类似， $q_z = 0.4\pi/d$ 时的结果几乎完全相同 [见图 4.6.1(b) 和 4.6.2(b)]，但 $q_z = 0$ 时的结果有显著的差别。最明显的区别在于图 4.6.2(a) 中带内集体激发模的频率比图 4.6.1(a) 高，这可以根据 (4.6.1) 式来理解：在 n_s 不变的情况下，随着势垒宽度的减小，超晶格的周期 d 减小， n_{eff} 增大，因而子带内等离子激元的色散曲线向上移动。事实上，如果将 $d = 460 \text{ \AA}$ 以及其它参数代入 (4.6.1) 式，可得 $\omega(q \rightarrow 0) = 15.74 \text{ meV}$ ，与图 4.6.2(a) 中子带内集体激发模的长波频率符合得很好。另外可以看出，随着垒宽的减小， $q_z = 0$ 时子带间的两支集体激发模的频率降低。因而与 $b = 600 \text{ \AA}$ 时相比，子带内激发模的色散带变宽而子带间激发模的色散带变窄。

当垒宽减小到一定程度时，随着量子阱之间耦合强度的增加，系统将由孤立的量子阱系统变为耦合的量子阱系统。图 4.6.3 为 $b = 60 \text{ \AA}$ 时 $q_z = 0$ 和 $q_z = 0.4\pi/d$ 两种情形下等离子激元的色散关系，其它参数与图 4.6.1 和图 4.6.2 相同。可以看出，

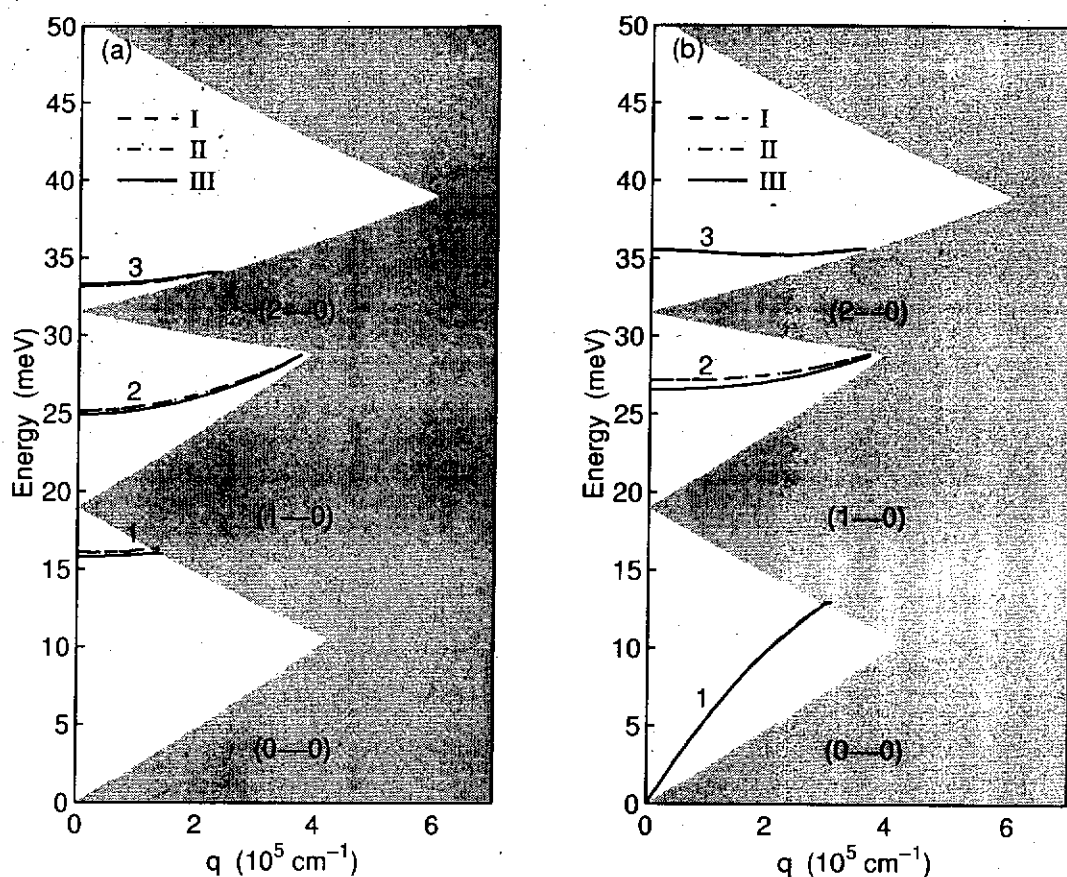


图 4.6.2 (a) $q_z = 0$ (b) $q_z = 0.4\pi/d$ 两种情形下垒宽 $b = 200 \text{ \AA}$ 时量子阱超晶格中等离激元的色散关系。 $a = 260 \text{ \AA}$, $n_s = 7.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。阴影区域为单粒子激发区。

由于此时耦合较强，超晶格的能带有一定的展宽，使得单粒子激发区的范围扩大，表现在 $q = 0$ 处的尖角变钝。从图 4.6.3(a) 可以看出， $q_z = 0$ 时的集体激发模发生了重要的变化，原本非阻尼的带内集体激发模此时消失了。根据 (4.6.1) 可以求出此时 $\omega(q \rightarrow 0) = 18.87 \text{ meV}$ ，位于 (1-0) 单粒子激发区的内部，因而被阻尼掉了。与图 4.6.1(a) 和图 4.6.2(a) 相比较可以发现，图 4.6.3(a) 中子带间的两支集体激发模继续向下移动，同时由于单粒子激发区的范围扩大，使得能量较高的带间模“3”已经很靠近 (2-0) 单粒子激发区的边界。与图 4.6.1(b) 和图 4.6.2(b) 相比，从图 4.6.3(b) 可以看出， $q_z = 0.4\pi/d$ 时子带间的集体激发模变化不大，而带内激发模则发生了重要变化，主要表现在出现了一个长波能隙。

总之，在本章中我们在原来的介电函数张量理论上推导了等离激元介电函数矩阵理论的一般表达式，建立了两种理论之间的表象变换关系。将介电函数的矩阵理论应用到量子阱超晶格中，在单电子哈密顿量的本征矢空间和傅里叶空间中导出了三套确定集体激发色散关系的方程并进行了数值计算，研究了阱间耦合强度对等离激元色散关系的影响，发现随垒宽的减小， $q_z \neq 0$ 时各支模的变化不大，但

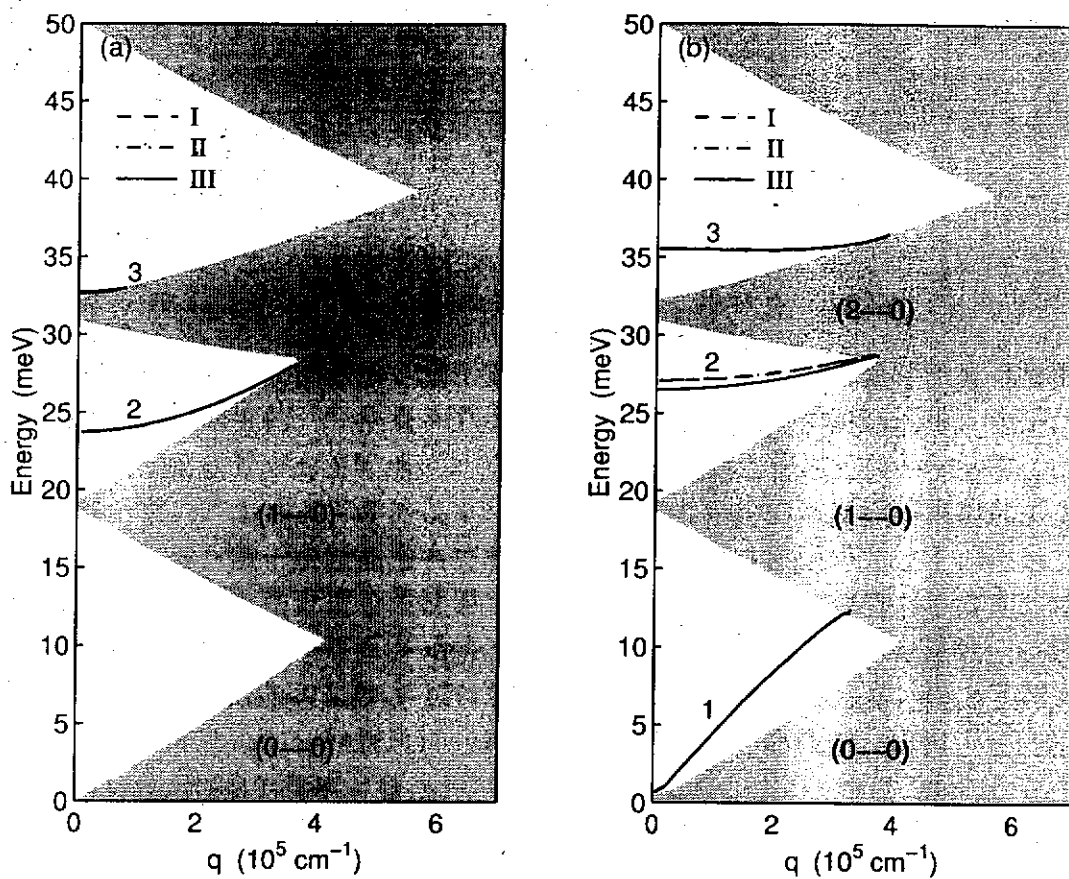


图 4.6.3 (a) $q_z = 0$ (b) $q_z = 0.4\pi/d$ 两种情形下垒宽 $b = 60 \text{ \AA}$ 时量子阱超晶格中等离激元的色散关系。 $a = 260 \text{ \AA}$, $n_s = 7.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 。阴影区域为单粒子激发区。

$q_z = 0$ 时的激发模发生了显著的变化，这主要表现在：(i) 带内集体激发模的频率随 b 的减小而增大，当耦合足够强时进入 (1-0) 单粒子激发区而被阻尼掉；(ii) 带间集体激发模的频率随 b 的减小而减小，向相应的单粒子激发区靠近。

总 结

半导体低维结构(超晶格、量子阱、量子线、量子点等)中集体激发性质的研究是凝聚态物理研究的一个热点并且经久不衰。由于在双量子阱结构中,电子的动能受到抑制,关联效应占主导地位,使得与电子-电子相互作用有关的一些多体效应能够凸现出来,产生许多有趣的现象,因而双量子阱结构的性质近年来引起了人们广泛的研究兴趣。量子阱超晶格中等离激元的性质也已被广泛研究过了,但以往的研究都是在介电函数张量理论的框架下进行的,指标较多,处理起来不方便。本文系统地研究了双量子阱中等离激元的性质,探讨了波函数的扩展和交迭效应、阱间耦合效应、不对称效应和交换-关联效应等对等离子激元的影响;另外,提出了等离子激元介电函数矩阵理论的一般表达式并将其应用到量子阱超晶格中,研究了阱间耦合效应对等离子激元性质的影响。获得的主要结果有:

一、研究了波函数的扩展和交迭效应对对称双量子阱中等离激元的影响,对二维层状气体(2DLG)模型下的近似结果与考虑电子波函数扩展和交迭效应时的结果进行了比较。发现当阱间势垒较厚时,2DLG模型在长波限下近似性较好;当势垒较薄时,电子波函数的扩展和交迭效应不能忽略。数值结果表明带间等离子激元模的长波能隙正比于基态与第一激发态之间的间距 Δ_{SAS} ,而不是象以前理论预测的那样,在强耦合时与 $\sqrt{\Delta_{SAS}}$ 成正比。

二、采用一种新的自洽方法计算了对称双量子阱的能级和波函数,其中电子密度、调制掺杂区电离层的厚度等参数是根据材料的性质、生长条件等自洽确定的。利用求得的能级和波函数在无规相近似下计算了对称双方形量子阱中的等离子激元,详细研究了两阱间的耦合对等离子激元色散关系的影响。发现在库仑耦合范围内,随着耦合强度的减小,光学和声学等离子激元模相互靠拢;在隧穿耦合范围内,带间等离子激元模对隧穿耦合很敏感,而带内等离子激元模则基本不受隧穿耦合的影响。我们计算了不同耦合强度下的退极化移动,结果表明随着耦合强度的增加,多体效应变强。

三、研究了隧穿耦合对不对称双量子阱中等离激元性质的影响,预言除了光学等离子激元模外,还可能存在另一支子带内的激发模。在弱隧穿耦合下,它位于单粒子激发区外,具有声学的色散关系;随着隧穿耦合的增加,它逐渐靠近并最终落入(0-0)单粒子激发区而被阻尼掉。同时发现,在强耦合时,带间等离子激元模位于

(1-0) 单粒子激发区上面；随着隧穿耦合的减小，它逐渐靠近 (1-0) 单粒子激发区并最终被阻尼掉。在一定的隧穿强度内，三支等离子激元模能够共存。

四、计入交换-关联修正，在与时间有关的局域密度近似下研究了不对称程度、隧穿耦合和交换-关联效应对不对称双量子阱中等离激元色散关系的影响。发现随着不对称性或势垒厚度的增加，原本阻尼的带内等离子激元模 ω_- 逐渐移出了 (0-0) 单粒子激发区，而子带间的等离子激元模 (ω_{10}) 逐渐向 (1-0) 单粒子激发区靠拢并被阻尼掉。在适当的条件下， ω_- 和 ω_{10} 能够与子带内的光学等离子激元模共存。交换-关联效应随电子密度的降低而增强，当电子密度低到一定程度时，交换-关联效应变得很重要。还计算了集体激发模的光谱权重，探讨了实验上观测到 ω_- 模的可能性。

五、在等离子激元介电函数张量理论的基础上，首次导出了介电函数矩阵理论的一般表达式，建立了两种理论之间的表象变换关系。将新的介电函数矩阵理论应用到量子阱超晶格中，分别在单电子哈密顿量的本征矢空间和傅里叶空间中导出了确定量子阱超晶格中等离激元色散关系的三组方程，研究了阱间耦合效应对等离子激元性质的影响，发现随垒宽的减小， $q_z \neq 0$ 时各支模的变化不大，但 $q_z = 0$ 时的激发模发生了显著的变化，这主要表现在：(i) 带内集体激发模的频率随 b 的减小而增大，当耦合足够强时进入 (1-0) 单粒子激发区而被阻尼掉；(ii) 带间集体激发模的频率随 b 的减小而减小，向相应的单粒子激发区靠近。