

柱型量子点中弱耦合磁极化子的激发态性质^{*}

赵翠兰 丁朝华 肖景林

(内蒙古民族大学物理与机电学院, 通辽 028000)

摘要: 应用线性组合算符和么正变换研究了在量子阱和抛物势作用下的柱型量子点中弱耦合磁极化子的性质. 对 AgBr 量子点的数值计算表明: 量子点中磁极化子的基态能量、激发态能量以及激发能均随特征频率、回旋共振频率的提高而增大; 随柱高的减小而增加, 且柱高愈小, 增加速度愈快; 激发态能量随温度的升高而增加. 这些结论说明, 由于量子点的受限和磁场的增大以及温度的升高使量子点的极化加强.

关键词: 量子点; 磁极化子; 特征频率; 量子阱

PACC: 6320K; 7138

中图分类号: O734 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2005)10-1925-04

1 引言

随着分子束外延(MBE)、金属有机化合物气相沉淀(MOCVD)等技术的发展, 纳米材料已经成为材料科学和凝聚态物理研究的热点. 由于纳米材料尺度的减小, 具有了一系列新的重要性质, 特别是量子点, 由于三维受限, 其量子效应更加明显, 这必将带来巨大的经济效益和社会效益, 因此, 许多学者对其进行了研究. 朱嘉麟等采用少体法对球型量子点进行研究, 结果表明: 施主态的结合能与量子点的形状大小、维数、限制势等有关, 且他们关于磁场诱导量子阱中不对称 D⁻ 态分解的理论预言, 已经被 McCombe 等人所证实^[1]. Charroul 等人^[2] 利用修正的 LLP 方法, 研究了磁场中柱型量子点内类氢杂质的结合能, 表明结合能与杂质在量子点中的位置、磁场强度以及量子点的半径有关. Zhu 等人^[3] 在有效质量近似下, 利用二阶 Rayleigh-schrodinger 微扰理论, 研究了 GaAs 抛物量子点中极化子自俘获能的温度和尺度依赖性. 数值计算表明: GaAs 抛物量子点中极化子自俘获能随量子点温度和尺度的增加而减小; 对小量子点, 温度效应更明显. Lee 等人^[4] 也研究了强磁场中抛物量子点内与声子相互作用系统的低能态性质, 数值计算表明: 在基态伴随有轨道

角动量和自旋角动量的跃迁中, 这一点与无电子-LO 声子相互作用时一样. Mu Khopadhyay 等人^[5] 利用 LLP 么正变换方法, 讨论了电子-LO 声子间耦合常数取任意值以及在任意受限强度下, 抛物量子点中电子第一激发态的极化修正. Kandemir 等人^[6] 通过引进一个试探波函数, 确定了极化效应对外磁场中束缚于类氢杂质的一个电子的低能态的影响, 结果表明: 电子-LO 声子间的相互作用、磁场、量子点受限情况对杂质结合能及共振质量均有影响. 周和顾等^[7] 用 Landau-pekar 变分法, 讨论了盘型量子点中极化子的性质, 表明磁极化子基态、激发态的束缚能、共振频率与受限强度、外磁场强度有关. 我们曾使用线性组合算符与么正变换相结合的方法研究量子点中极化子、磁极化子的基态性质^[8,9], 得到了理想的结果, 本文将采用这种方法研究磁场中柱型量子点内的极化子在抛物势作用下的激发态性质.

2 理论计算

设电子被限制在半径为 r_0 、高为 L 的柱型量子点内. 建立直角坐标系 σxyz , 且 oz 轴在柱的中心轴线上, xoy 平面与柱的中心轴线垂直, 并通过柱的中点. 设电子在 z 方向被限制在无限深的势阱里, 在 xoy 平面内被抛物势限制, 外磁场 B 沿 z 轴正方向,

^{*} 国家自然科学基金资助项目(批准号:10347004)

赵翠兰 女, 1962 年出生, 理学硕士, 副教授, 从事凝聚态光学性质研究.
2005-03-14 收到, 2005-05-28 定稿

则电子-LO 声子相互作用的哈密顿量为

$$H = \frac{(p + eA/c)^2}{2m^*} + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 + \sum_q \hbar \omega_{LO} b_q^\dagger b_q + [V_q e^{iq \cdot r} b_q + HC] + V(z) \tag{1}$$

其中

$$V_q = i \left[\frac{\hbar \omega_{LO}}{q} \right] \left[\frac{\hbar}{2m^* \omega_{LO}} \right]^{\frac{1}{4}} \left[\frac{4}{V} \right]^{\frac{1}{2}} \tag{2}$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| \leq \frac{L}{2} \\ & |z| > \frac{L}{2} \end{cases} \tag{3}$$

$$= \left[\frac{e^2}{2\hbar \omega_{LO}} \right] \left[\frac{2m^* \omega_{LO}}{\hbar} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & & \\ & & 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

式中 m^* 为裸带质量; (z) 为 xoy 平面内的二维坐标矢量; ω_0 为量子点在 xoy 平面的特征频率; b_q^\dagger (b_q) 是波矢为 q 的体纵光学声子的产生(湮灭)算符; $r = (x, y, z)$ 为电子坐标; L 为量子点的柱高; A 为矢量势.

进行两次么正变换

$$U_1 = \exp(-i \sum_q \hbar q \cdot r b_q^\dagger b_q) \tag{5}$$

$$U_2 = \exp(i \sum_q (f_q b_q^\dagger - f_q^* b_q)) \tag{6}$$

并且对 xoy 平面内电子的运动引进线性组合算符

$$p_j = \left[\frac{m^* \hbar}{2} \right]^{\frac{1}{2}} (a_j + a_j^\dagger) \tag{7}$$

$$j = i \left[\frac{\hbar}{2m^*} \right]^{\frac{1}{2}} (a_j - a_j^\dagger) \quad j = x, y$$

得到

$$H = H_0 + H \tag{8}$$

其中

$$H_0 = \frac{p_z^2}{2m^*} - \frac{\hbar}{m^*} \sum_q p_z q_z (f_q^* + b_q^\dagger) (f_q + b_q) + \frac{\hbar}{4} \sum_j (2a_j^\dagger a_j + a_j a_j^\dagger + a_j^\dagger a_j^\dagger + 1) + \sum_q \left[\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar \omega_{LO} \right] (b_q^\dagger + f_q^*) (b_q + f_q) + [V_q (b_q^\dagger + f_q^*) + HC] - \frac{\hbar}{m^*} \sum_{q,j} \left[\frac{m^* \hbar}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \times q_j (a_j - a_j^\dagger) (b_q^\dagger + f_q^*) (b_q + f_q) + \frac{i e B}{2m^*} \left[\frac{\hbar}{2m^*} \right]^{\frac{1}{2}} [(a_y + a_y^\dagger) \left[\frac{m^* \hbar}{2} \right]^{\frac{1}{2}} - \hbar q_y (b_q^\dagger + f_q^*) (b_q + f_q)] (a_x - a_x^\dagger) - \frac{i e B}{2m^*} \left[\frac{\hbar}{2m^*} \right]^{\frac{1}{2}} [(a_x + a_x^\dagger) \left[\frac{m^* \hbar}{2} \right]^{\frac{1}{2}} -$$

$$\hbar q_x (b_q^\dagger + f_q^*) (b_q + f_q)] (a_y - a_y^\dagger) + \left[\frac{\hbar^2 B^2}{16m^{*2}} + \frac{\hbar \omega_0^2}{4} \right] \sum_j (2a_j^\dagger a_j + a_j a_j^\dagger - a_j^\dagger a_j^\dagger - a_j a_j) \tag{9}$$

H 是具有不同波矢的声子之间的相互作用,将其忽略.

选取尝试波函数为 $|\psi\rangle = |z\rangle |n_q\rangle |n_j\rangle$, 其中 $|z\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{Lz}{L}\right)$, ($l=1,3,5,\dots$) 是电子 z 方向波函数, $|n_q\rangle$ 是声子态, $|n_j\rangle$ 是极化子态. 则(9)式对 $|\psi\rangle$ 的期待值为

$$F = \langle \psi | H_0 | \psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{L}{L} \right)^2 + \left[\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar \omega_0^2}{2} + \frac{\hbar \omega_c^2}{8} \right] (1 + \sum_j n_j) + \sum_q \left[\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar \omega_{LO} \right] (n_q + |f_q|^2) + \langle V_q^* f_q^* + HC \rangle \tag{10}$$

当系统处于基态时, $|\psi_0\rangle = |z_0\rangle |0_q\rangle |0_j\rangle$, 其中 $|z_0\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{Lz}{L}\right)$, 则变分参量函数

$$F = \langle \psi_0 | H_0 | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{L}{L} \right)^2 + \frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar \omega_0^2}{2} + \frac{\hbar \omega_c^2}{8} + \sum_q \left[\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar \omega_{LO} \right] |f_q|^2 + \langle V_q^* f_q^* + HC \rangle \tag{11}$$

(11)式分别对 f_q^* 和 f_q 取变分,得

$$f_q = - \frac{V_q^*}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar \omega_{LO}} \tag{12}$$

$$= \frac{1}{2} \sqrt{\omega_c^2 + 4 \omega_0^2} \tag{13}$$

将(12),(13)两式带入(11)式,并将求和化为积分,得基态能量(以 $\hbar \omega_{LO}$ 为单位)为

$$E_0 = - \frac{\hbar}{2m^* \omega_{LO}} \left(\frac{L}{L} \right)^2 + \frac{\hbar}{2} (\omega_c^2 + 4 \omega_0^2)^{\frac{1}{2}} \tag{14}$$

将(12)、(13)两式带入(10)式,并将求和化为积分,得到激发态 $|\psi_{lzx}\rangle = |l_z\rangle |0_q\rangle |n_j\rangle$ 和激发态 $|\psi_{n_j\text{ex}}\rangle = |n_j\rangle |0_q\rangle |z_0\rangle$ 的能量分别为

$$E_{lz} = \langle \psi_{lzx} | H_0 | \psi_{lzx} \rangle = - \frac{\hbar}{2m^* \omega_{LO}} \left(\frac{L}{L} \right)^2 + \frac{1}{2} (\omega_c^2 + 4 \omega_0^2)^{\frac{1}{2}} \tag{15}$$

$$E_{n_j} = \frac{n_j \omega_c}{H_0} + \frac{\hbar}{2m^* L_0} \left(\frac{2}{L} \right)^2 (1 + 2n) + \frac{\hbar}{2m^* L_0} \left(\frac{2}{L} \right)^2 \quad (16)$$

(16) 式已经考虑了电子在 xoy 平面内运动的对称性, 认为平均说来 $n_x = n_y = n$. 由基态到各个激发态的激发能分别为

$$E_{1z} = \frac{\hbar(L^2 - 1)}{2m^* L_0} \left(\frac{2}{L} \right)^2 \quad (17)$$

$$E_{n0} = n \left(\frac{2}{L_0} \right)^2 \quad (18)$$

3 结果和讨论

选取 AgBr 量子点作数值计算, 所用参量 (Ag-Br: $\omega_c = 4.68$, $\omega_0 = 10.6$, $m^* = 0.2148m_e$, $\hbar/L_0 = 17.1\text{meV}$, $\omega_c = 1.56$) 选自文献 [10], m_e 是自由电子质量. 由 (14), (15), (16) 式得到基态能量 E_0 、激发态能量 E_{1z} , E_n 随特征频率 ω_0 、回旋共振频率 ω_c 和柱高 L 的变化曲线. 图 1 表示当耦合常数 ω_c 、回旋共振频率 ω_0 、柱高 L 给定时, E_0 , E_{3z} 和 E_1 随 ω_0 变化的关系曲线. 从中看到, E_0 , E_{3z} 和 E_1 随 ω_0 的增加而增加, 这是由于 ω_0 增加时, 电子在平行于 xoy 平面内的受限增强, 使极化子的能量增加所致. 由图 1 还可以看出, 当耦合常数 ω_c 、特征频率 ω_0 、柱高 L 给定时, E_0 , E_{3z} 和 E_1 随 ω_c 的增加而增加. 这是由于外磁场强度增加时, 电子在磁场中受力增大, 电子与外磁场之间的相互作用增强, 导致电子与外磁场中的相互作用能量增加所致. 图 2 表示当耦合常数 ω_c 、特征频率 ω_0 和回旋共振频率 ω_c 给定时, E_0 , E_{1z} 和 E_n 随柱高 L 变化的关系曲线. 从中看到, E_0 , E_{1z} 和 E_n 随柱高 L 的减小而增加, L 愈小, 增加愈快, 当 L 减小到某一值时, 不能形成束缚极化子, 这是由于弱耦合下, 电子与晶格振动之间的相互作用能量太小所致.

由于量子点的高度愈小特征频率愈大, 量子点的受限愈强. 所以, 图 1 和图 2 也说明, 不论极化子处于基态还是激发态, 均会由于量子点的受限和磁场的增强而导致极化增强.

由 (17) 式可见, L 愈大, 能差愈小, 当 L 趋于无穷大时, 能差趋于零, 量子尺寸效应消失. (17) 和 (18) 式也说明, 量子点受限愈强 (L 愈小, ω_0 愈大), 激发能愈大. 这是因为受限增强时, 电子与晶格振动

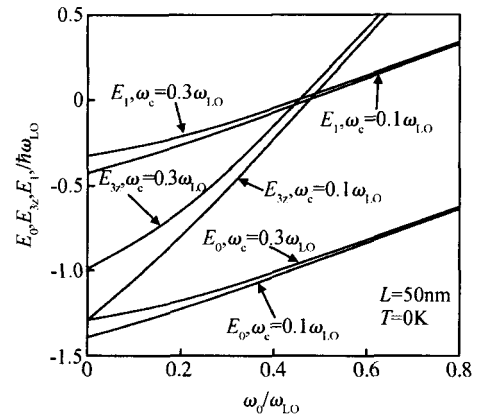


图 1 能量 E_0 , E_{3z} 和 E_1 随特征频率 ω_0 的变化曲线
Fig. 1 Variational curves of energies E_0 , E_{3z} and E_1 with characteristic frequency ω_0

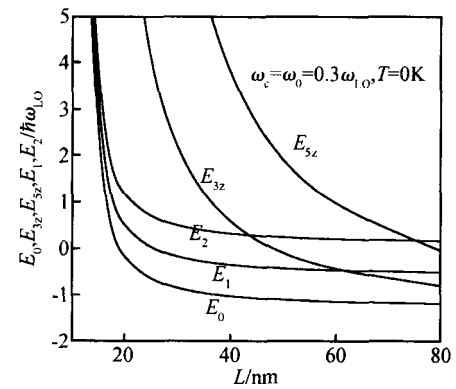


图 2 能量 E_0 , E_{3z} , E_{5z} , E_1 和 E_2 随柱高 L 的变化曲线
Fig. 2 Variational curves of energies E_0 , E_{3z} , E_{5z} , E_1 and E_2 with cylinder height L

之间的相互作用增强, 进而能级劈裂增大所致.

由经典玻尔兹曼统计规律

$$n = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar}{k_B T}\right) - 1} \quad (19)$$

以及 (13), (16) 式也可以讨论磁极化子的温度效应. 将 (13)、(16) 和 (19) 三式联立, 可以获得激发态能量随温度变化的关系. 图 3 表示当 L , ω_0 和 ω_c 给定时, 激发态能量 E_n 随温度 T 变化的关系曲线. 可见, E_n 随温度的升高而增加, 这是由于温度升高时, 电子的热运动动能增大, 使得激发态上的极化子增多所致. 并且, 当温度高于某个值时, 束缚极化子解体, 激发态不存在. 从图 3 还可以看出, 激发能在不同的磁场中随温度变化的规律相同, 但磁场愈强, 能量愈高. 总之, 柱型量子点中磁极化子的激发态、激发能均由于量子点的受限、磁场的增大以及温度的升高

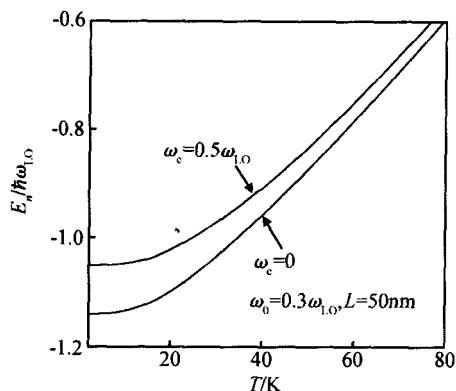


图 3 能量 E_n 随温度 T 变化的关系曲线

Fig. 3 Variational curves of energy E_n with temperature T

而增强,即使量子点的极化加强.

参考文献

- [1] Jiang Z X, McCombe B D, Zhu J L, et al. Magnetic-field-induced unbinding of the off well-center D^{-1} singlet state in GaAs/ GaAlAs quantum wells. *Phys Rev B*, 1997, 56: R1692
- [2] Charrour R, Bouhassoune M, Fliyou M, et al. Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in cylindrical quantum dot. *Phys B*, 2000, 293: 137

- [3] Zhu K D, Gu S W. Temperature effects on the self-trapping energy of a polaron in a GaAs parabolic quantum dot. *J Mater Sci Technol*, 1994, 10: 131
- [4] Lee C M, Gu S W. Polaron effect on energy spectrum in two-electron quantum dot under magnetic field. *Solid State Communications*, 2000, 116: 51
- [5] Mu Khopadhyay S, Chatterjee A. Relaxed and effective-mass excited state of a quantum dot polaron. *Phys Rev B*, 1998, 58: 2088
- [6] Kandemir B S, Cetin A. Ground and first-excited state energy of impurity magnetopolaron in an anisotropic quantum dot. *Phys Rev B*, 2002, 65: 054303/ 1
- [7] Zhou H Y, Gu S W. Energy levels of strong coupling magnetopolaron in quantum dot. *J Shanghai University*, 2001, 5: 40
- [8] Wang Ligu, Xiao Jinglin, Li Shushen. Properties of strong-coupling magnetopolaron in semiconductor quantum dot. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2004, 25(8): 937 (in Chinese) [王立国, 肖景林, 李树深. 半导体量子点中强耦合磁极化子的性质. *半导体学报*, 2004, 25(8): 937]
- [9] Xiao Jinlin, Xiao Wei. Effective mass of polaron in semiconductor quantum dots. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2004, 25(11): 1428 (in Chinese) [肖景林, 肖玮. 半导体量子点中极化子的有效质量. *半导体学报*, 2004, 25(11): 1428]
- [10] Hellwege K H. *Semiconductors physics of - and - compound magnetic semiconductor*. Landolt-Bornstein, New series, Group , Vol. 17, Pt. a, Springer-Verlag, Berlin, 1982

Properties of a Weak-Coupling Magnetopolaron in Cylindrical Quantum Dot *

Zhao Cuilan, Ding Zhaohua, and Xiao Jinglin

(College of Physics and Electr Engineering, Inner Mongolia National University, Tongliao 028000, China)

Abstract: The properties of a magnetopolaron with electron-LO-phonon weak-coupling in cylindrical quantum dot, which was in quantum well and parabolic potential, were investigated by using the linear combination operator and unitary transformation methods. Numerical calculations for AgBr quantum dot indicate that the ground state energy, excited states energies and excited energies all increase with increasing characteristic frequency and cyclotron-resonance frequency, and with decreasing cylindrical height, the smaller the cylindrical height is, the faster they increase. Numerical calculation also indicates that excited state energy increases with increasing temperature. These indicate polar of quantum dot is enlarged with increasing confinement of quantum dot, magnetic field strength and temperature.

Key words: quantum dot; magnetopolaron; characteristic frequency; quantum well

PACC: 6320 K; 7138

Article ID: 0253-4177 (2005) 10-1925-04

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 10347004)

Zhao Cuilan female, was born in 1962, associate professor. She is working with luminescence properties of condense matter.

Received 14 March 2005, revised manuscript received 28 May 2005

© 2005 Chinese Institute of Electronics