

# 抛物量子线中极化子的温度依赖性\*

丁朝华<sup>†</sup> 赵翠兰 肖景林

(内蒙古民族大学物理与机电学院, 通辽 028043)

**摘要:** 研究了抛物量子线中极化子的温度效应. 采用改进的线性组合算符法、Lagrange 乘子和变分法, 在考虑电子与 LO 声子相互作用情况下, 分别研究了抛物量子线中强耦合和弱耦合两种情况下极化子的有效质量和光学声子平均数的温度依赖性. 对 RbCl 晶体和 CdTe 晶体进行了数值计算, 结果表明, 两种情况下极化子的有效质量随温度的升高而减少, 光学声子平均数均随温度的增高而增大.

**关键词:** 极化子; 有效质量; 光学声子平均数; 温度效应

**PACC:** 7138

**中图分类号:** O511.2

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2006)S0-0054-04

## 1 引言

近年来,低维量子体系所具有的量子尺寸效应、量子干涉效应等量子现象引起了越来越多的关注,其研究价值无论对基础物理,还是对实验器件都具有深远的意义.所以,低维量子结构的研究目前已成为凝聚态物理研究的热点,低维量子系统包括量子阱、量子线和量子点等.由于量子线具有的准一维特性,使得量子线中的电子在两个方向上的运动受到很强的约束,只能在线长的方向上自由运动,这种特性导致了量子线存在许多奇异的物理效应,这些效应可用来制造光电器件,它们在半导体激光器、高电子传输率的传输器方面具有非常广泛的应用前景.因此,这些系统中电子的物理特性成为关注的焦点. Dagan 等人<sup>[1,2]</sup>采用变分法研究了矩形量子线中极化子的能量及有效质量. Guo 等人<sup>[3]</sup>采用密度矩阵法研究了矩形量子线中极化子相关问题.本文作者<sup>[4,5]</sup>研究了抛物量子线中极化子相关问题及量子点中极化子的性质. 额等人<sup>[6,7]</sup>研究了晶体表面和半导体膜中极化子的温度效应问题,但目前对量子线中极化子的温度效应问题研究甚少.本文采用改进的线性组合算符法和有效质量下的变分法研究抛物量子线中极化子的有效质量和平均声子数的温度效应.

## 2 哈密顿量

极性晶体材料形成的抛物量子线中,考虑了电

子与光学声子(LO 声子)的相互作用后,电子-声子系统的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m_b} p^2 + \sum_q \hbar\omega_{LO} a_q^+ a_q + \frac{1}{2} m_b \omega_0^2 \rho^2 + \sum_q [V_q a_q e^{iq \cdot r} + h \cdot c] \quad (1)$$

$$V_q = \left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{q}\right) \left[\frac{\hbar}{2m_b \omega_{LO}}\right]^{\frac{1}{4}} \left[\frac{4\pi\alpha}{V}\right]^{\frac{1}{2}},$$

$$\alpha = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}}\right) \left(\frac{2m_b \omega_{LO}}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right) \quad (2)$$

(1)式中各量的物理意义见文献[8].

为计算量子线中极化子的有效质量,对电子运动的动量和坐标引进改进的线性组合算符:

$$p_j = \left(\frac{m_b \hbar \lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (b_j + b_j^+ + p_{0j}),$$

$$r_j = i \left(\frac{\hbar}{2m_b \lambda}\right)^{\frac{1}{2}} (b_j - b_j^+) \quad (3)$$

其中  $j = x, y$  和  $z$ ;  $\lambda$  和  $p_{0j}$  为变分参量.

由于系统的总动量  $\mathbf{P}_T = \mathbf{p} + \sum_q a_q^+ a_q \hbar \mathbf{q}$  与系统的哈密顿量对易,所以其本征值为一守恒量,将(3)式代入守恒量  $H - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_T$ ,然后再作关于  $U_1 = \exp(-ia \sum_q \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} a_q^+ a_q)$  和  $U_2 = \exp[\sum_q (f_q a_q^+ - f_q^* a_q)]$  的两次么正变换得

$$H_1 = - \left(\frac{m_b \hbar \lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_j u_j (b_j + b_j^+ + p_{0j}) -$$

$$(1-a) \sum_q (a_q^+ + f_q^*) (a + f_q) \hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{u} +$$

$$\frac{\hbar \lambda}{4} \sum_j [b_j b_j + b_j^+ b_j^+ + 2b_j^+ b_j + p_{0j}^2 + 1] -$$

\* 国家自然科学基金资助项目(批准号:10347004)

<sup>†</sup> 通信作者. Email: dzhaohua@126.com

2005-11-10 收到

$$\begin{aligned} & \hbar a \left( \frac{\hbar \lambda}{2m_b} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_q (a_q^+ + f_q^*) (a_q + f_q) \times \\ & \sum_j (b_j^+ + b_j + p_{0j}) q_j + \sum_q \left( \frac{a^2 \hbar^2 q^2}{2m_b} + \hbar \omega_{LO} \right) \times \\ & (a_q + f_q) (a_q^+ + f_q^*) + \frac{\hbar \lambda}{2} \sum_j [(b_j^+ + b_j) p_{0j}] + \\ & \frac{\hbar \omega_0^2}{4\lambda} (2b_x^+ b_x + 2 - b_x^+ b_x^+ - b_x b_x + 2b_y^+ b_y - \\ & b_y^+ b_y^+ - b_y b_y) + \sum_q \{ V_q (a_q + f_q) \exp[(1-a) \times \\ & \left( \frac{\hbar}{2m_b \lambda} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_j q_j b_j^+] \exp[-(1-a) \left( \frac{\hbar}{2m_b \lambda} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_j q_j b_j] \times \\ & \exp[- \left( \frac{\hbar q^2}{4m_b \lambda} \right) (1-a)^2] + h \cdot c \} \quad (4) \end{aligned}$$

上式中  $u$  是拉格朗日乘子。

为确定变分参量,先求  $H_1$  的期待值  $F(\lambda, f_q, \mathbf{u}, p_0) = \langle \Phi | H_1 | \Phi \rangle$ , 其中  $|\Phi\rangle = |\varphi(\rho)\rangle | \{n_q\} \rangle | \{n_j\} \rangle$  为有限温度下的系统尝试波函数,  $|\varphi(\rho)\rangle$  为描写电子的波函数,  $| \{n_q\} \rangle$  和  $| \{n_j\} \rangle$  分别表示 LO 声子态和极化子态。

$$\begin{aligned} F(\lambda, f_q, \mathbf{u}, p_0) &= \frac{3}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \lambda + \frac{\hbar \lambda}{4} p_0^2 - \\ & \left( \frac{m_b \hbar \lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{p}_0 + \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar \omega_0^2}{\lambda} + \sum_q \left[ \frac{a^2 \hbar^2 q^2}{2m_b} + \hbar \omega_{LO} - \right. \\ & \left. \hbar a \left( \frac{\hbar \lambda}{2m_b} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q} - \hbar (1-a) \mathbf{q} \cdot \mathbf{u} \right] (|f_q|^2 + n_q) + \\ & \sum_q \{ V_q f_q e^{-\frac{\hbar q^2}{4m_b \lambda} (1-a)^2} [1 - (1-a)^2 \frac{n \hbar q^2}{2m_b \lambda}] + h \cdot c \} \quad (5) \end{aligned}$$

上式计算过程中,忽略了电子在反冲效应中发射和吸收不同波矢的声子之间相互作用所引起的附加能量以及波矢的高阶小量和双声子过程。

下面分强耦合和弱耦合两种情形分别计算抛物量子线中极化子的有效质量和光学声子平均数的温度依赖性。

(5)式中的  $a$  表征电子-声子耦合强弱程度: $a=0$  代表强耦合; $a=1$  代表弱耦合.把  $a=0$  和  $a=1$  分别代入(5)式,再对各自的变分参量变分后可得

$$\begin{aligned} F(\lambda, \mathbf{u}) &= \frac{3}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \lambda + \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar \omega_0^2}{\lambda} + \\ & \sum_q (\hbar \omega_{LO} - \hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}) n_q - \frac{1}{2} m_b u^2 - \\ & \alpha \hbar \sqrt{\frac{\omega_{LO} \lambda}{\pi}} \left( \frac{3}{4} n^2 - n + 1 \right) - \\ & \frac{\alpha \lambda}{3 \hbar \omega_{LO}} \sqrt{\frac{\omega_{LO} \lambda}{\pi}} (1 - 3n + \frac{15}{4} n^2) m_b u^2 \quad (6) \\ F(u) &= \frac{3 \hbar}{2(6-\alpha)} \left[ \left( \frac{2m_b}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{u} - \sum_q \left( \frac{2\hbar}{m_b} \right)^{\frac{1}{2}} n_q \mathbf{q} \right]^2 + \\ & \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{3}{2} \hbar \lambda + \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{3}{2}} \hbar \omega_0 + \end{aligned}$$

$$\sum_q (\hbar \omega_{LO} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_b}) n_q - \alpha \hbar \omega_{LO} \quad (7)$$

利用  $|\Phi\rangle$ 、(1)、(6)和(7)式可求得有限温度下强、弱耦合极化子的能量期待值  $\langle \Phi | U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 | \Phi \rangle$  和动量期待值  $\langle \Phi | U_2^{-1} U_1^{-1} P U_1 U_2 | \Phi \rangle$ , 并由此可得到两种情况下极化子的有效质量和电子周围光学声子平均数分别为

$$m^* = \left[ 1 + \frac{2}{3} \times \frac{\alpha \lambda}{\hbar \omega_{LO}^2} \left( \frac{\lambda \omega_{LO}}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (1 - 3n + \frac{15}{4} n^2) \right] m_b \quad (8)$$

$$\begin{aligned} N &= \sum_q |f_q|^2 + \sum_q n_q = \alpha \left( \frac{\lambda}{\omega_{LO} \pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ 1 - n + \right. \\ & \left. \frac{3}{4} n^2 + \frac{\lambda}{\hbar \omega_{LO}^2} (1 - 3n + \frac{15}{4} n^2) m_b u^2 \right] + \sum_q n_q \quad (9) \end{aligned}$$

$$m^* = \frac{6}{6-\alpha} \left( m_b + \frac{1}{u} \sum_q n_q q \right) \quad (10)$$

$$\begin{aligned} N &= \frac{\alpha}{2} \left\{ 1 + \frac{9}{2(6-\alpha)^2 \omega_{LO}} \left[ \left( \frac{2m_b}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} u + \right. \right. \\ & \left. \left. \sum_q \left( \frac{2\hbar}{m_b} \right)^{\frac{1}{2}} n_q q \right]^2 \right\} + \sum_q n_q \quad (11) \end{aligned}$$

在有限温度下,极化子的性质是电子-声子系对各种状态的统计平均,由量子统计学知电子和声子数的平均值分别为  $\bar{n} = [\exp(\frac{\hbar \lambda}{k_B T}) - 1]^{-1}$  和  $\bar{n}_q = [\exp(\frac{\hbar \omega_{LO}}{k_B T}) - 1]^{-1}$ , 把(8)~(11)式中的电子数  $n$  和声子数分别以其平均值代替,便可得到强、弱耦合两种情况下抛物量子线中极化子的有效质量和光学声子数。

### 3 数值分析与讨论

为了更清楚地说明温度对抛物量子线中极化子性质与温度的关系,分别选取 RbCl 和 CdTe 量子线对强耦合和弱耦合进行数值计算,所用参量 (RbCl:  $\hbar \omega_{LO} = 21.45 \text{meV}$ ,  $\alpha = 6.3$ ,  $m = 0.432 m_e$ ; CdTe:  $\hbar \omega_{LO} = 20.83 \text{meV}$ ,  $\alpha = 0.315$ ,  $m = 0.091 m_e$ ) 选自文献[9].

图 1~4 分别表示强、弱耦合时量子线中极化子的有效质量  $m^*$  与温度  $T$  的关系曲线及量子线中电子周围的光学声子平均数  $N$  与温度  $T$  的关系曲线.从图 1 和图 2 中可以看到,  $m^*$  随  $T$  的升高而减小,与额等人[7]计算的表面极化子的结论一致.这是因为随温度升高,晶格热振动增强,电子-声子之间相互作用减弱,从而使声子对电子的有效质量贡献减小.从图 3 和图 4 中知,  $N$  随  $T$  的增大而增大。

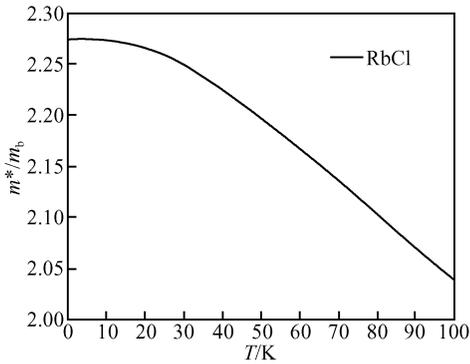


图 1 极化子的有效质量  $m^*$  和温度  $T$  的关系曲线(强耦合时)

Fig.1 Relational curve of the effective mass  $m^*$  of the polaron to temperature  $T$ (strong-coupling)

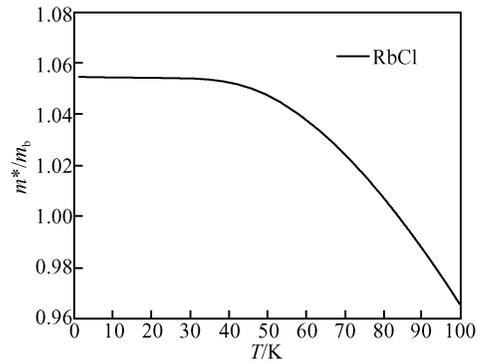


图 2 极化子的有效质量  $m^*$  和温度  $T$  的关系曲线(弱耦合时)

Fig.2 Relational curve of the effective mass  $m^*$  of the polaron to temperature  $T$ (weak-coupling)

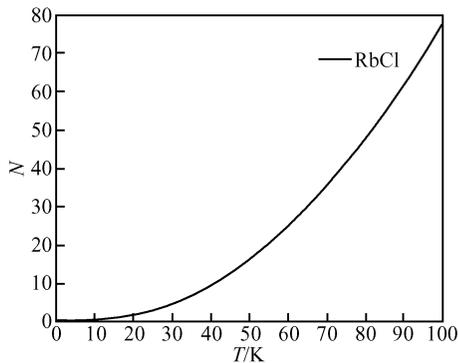


图 3 极化子的平均声子数  $N$  和温度  $T$  的关系曲线(强耦合时)

Fig.3 Relational curve of the mean number of optical phonon  $N$  of the polaron to temperature  $T$ (strong-coupling)

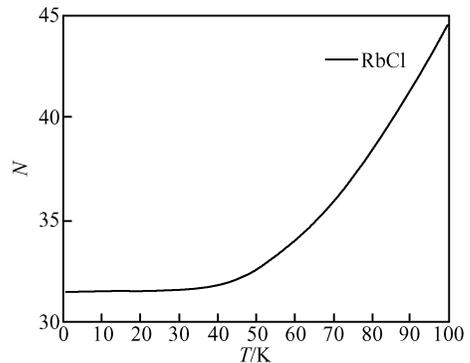


图 4 极化子的平均声子数  $N$  和温度  $T$  的关系曲线(弱耦合时)

Fig.4 Relational curve of the mean number of optical phonon  $N$  of the polaron to temperature  $T$ (weak-coupling)

## 4 结论

通过上述计算过程可知,抛物量子线中极化子的有效质量随温度的升高而减小,光学声子平均数和振动频率随温度的增大而增大。

## 参考文献

- [1] Degani M H, Hipolito O. Exciton binding energy in quantum-well wires. *Phys Rev B*, 1987, 35: 9345
- [2] Degani M H, Hipolito O. Interaction of optical phonons with electrons in GaAs quantum wires. *Solid State Commun.* 1988, 65(10): 1185
- [3] Guo K X. Influence of surface optical phonons on third-harmonic generation in cylindrical quantum wires. *Acta Photonica Sin.* 1998, 27: 391
- [4] Ding Zhaohua, Zhao Cuilan, Xiao Jinglin. Effective mass of strong-coupling magnetopolaron in a parabolic quantum wire. *Journal of Optoelectronics • Laser*, 2005, 16(2): 240 (in

Chinese)[丁朝华,赵翠兰,肖景林.抛物量子线中强耦合磁极化子的有效质量. *光电子·激光*, 2005, 16(2): 240]

- [5] Wang Ligu, Xiao Jinglin, Li Shushen. Properties of strong-coupling magnetopolaron in semiconductor quantum dots. *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]
- [6] Eerdunchaolu, Xiao Jinglin. Magnetic field and temperature dependence of effective mass of the surface in polaron crystals. *Journal Infrared Millimeter Waves*, 1997, 16(5): 384 (in Chinese)[额尔顿朝鲁,肖景林.极性晶体中表面极化子有效质量的磁场和温度依赖性. *红外与毫米波学报*, 1997, 16(5): 384]
- [7] Eerdunchaolu, Li Shushen, Xiao Jinglin. Effects of lattice vibration on self-trapping energy of polaron of electron-surface phonons strong-coupling in polar semiconductor slab. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2001, 22(6): 715 (in Chinese)[额尔顿朝鲁,李树深,肖景林.晶格热振动对极性半导体膜中电子-表面声子强耦合极化子自陷能的影响. *半导体学报*, 2001, 22(6): 715]
- [8] Ding Zhaohua, Bai Xufang, Xiao Jinglin. The properties of polarons in parabolic quantum wires. *Journal of Inner Mon-*

golia University for Nationalities, 2005, 20(1):1 (in Chinese)  
[丁朝华, 白旭芳, 肖景林. 抛物量子线中极化子的性质. 内蒙古民族大学学报, 2005, 20(1):1]

[9] Hellwege K H. Semiconductors physics of II-VI and I-VII compound magnetic semiconductor. Landolt-Börnstein, Springer-Verlag, Berlin, 1983

## Temperature Dependences of Polaron in a Parabolic Quantum Wire<sup>\*</sup>

Ding Zhaohua<sup>†</sup>, Zhao Cuilan, and Xiao Jinglin

(College of Physics and Electromechanics, Inner Mongolia National University, Tongliao 028043, China)

**Abstract:** Taking into account the interaction of the electron with optical phonon modes, the temperature dependences of polaron in parabolic quantum wires in polar crystals, which are both weak-coupling and strong-coupling, were investigated respectively by using Tokuta's improved linear combination operator and the variational methods. Numerical calculation for RbCl and CdTe crystals indicated that the effective mass  $m^*$  of polaron will decrease with increasing of temperature  $T$ , the mean number  $N$  of optical phonon and vibration frequency  $\lambda$  of polaron will increase with increasing of temperature  $T$ .

**Key words:** polaron; effective mass; mean number of optical phonon; temperature dependence

**PACC:** 7138

**Article ID:** 0253-4177(2006)S0-0054-04

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 10347004)

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: dzhaohua@126.com

Received 10 November 2005