

半导体量子点中极化子的有效质量*

肖景林¹ 肖 玮²

(1 内蒙古民族大学物理系, 通辽 028043)

(2 北京信息工程学院基础部, 北京 100101)

摘要: 研究了半导体量子点中极化子的有效质量. 采用改进的线性组合算符方法, 导出在电子-体纵光学声子(LO)强耦合时抛物量子点中极化子的振动频率、相互作用能和有效质量随受限强度和电子-声子耦合强度的变化. 对 RbCl 晶体量子点进行了数值计算, 结果表明, 量子点受限越强, 半导体量子点中强耦合极化子的振动频率和有效质量就越大; 极化子的相互作用能随受限强度的增加先急剧增加, 当达到极值后, 随受限强度的增加而急剧减少.

关键词: 半导体量子点; 极化子; 受限强度; 有效质量

PACC: 6320; 7138

中图分类号: O469

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2004)11-1428-05

1 引言

近几年纳米技术的飞速发展, 极大地推进了对低微系统的广泛研究. 尤其是纳米半导体量子点的研究更为引人注目, 其所具有的新颖的光电性质与输运特性, 正在成为量子功能器件研究中的一个热点领域. 许多学者采用各种方法从理论和实验上研究了极化子对半导体量子点性质的影响. Zhu 等^[1,2]采用二级 Rayleigh-Schrodinger 微扰理论研究了抛物量子点和抛物量子点中极化子态的性质. Zhou 和 Gu^[3]在连续介质近似下导出了矩形量子点中极化子表面光学声子模和其色散的关系. Mukhopadhyay 等^[4]采用 Feynman-Haken 路径积分理论得出有抛物约束势的半导体量子点中电子基态能量的极化子修正. Lepine 等^[5]用 Matz 和 Burkey 的 Fock 近似研究了在抛物量子点中大极化子的基态能量. 根据 Lee-Low-Pines-Gross 的方法, Mukhopadhyay 等^[6]得到了抛物半导体量子点中电子第一激发态能量的极化子修正. Hirose 和 Wingree^[7]采用自旋密度函数理论研究了二维抛物量子点的电子态. 采用有效质量近似和修正的 Lee-Low-Pines 变分方法, Char-

rour 等^[8]从理论上研究了约束纵光学声子和两类表面光学声子对柱形量子点中浅旋主结合能的影响. Li 和 Arakawa^[9]把连续色散流体动力理论应用到研究球型半导体量子点中约束光学声子的性质. Es-Sbai 等^[10]用变分方法研究体纵光学声子对半导体 GaAs 立方量子点中杂质束缚极化子结合能的影响. 利用曲线坐标系统, Cantele 等^[11]计算了约束在半导体椭球型量子点中粒子的有效质量. Xie^[12]利用少体物理的方法, 研究了半导体量子点中负施主杂质低激发态能谱的极化子效应. 但是, 还没有人采用线性组合算符法研究量子点中极化子的性质. 本文作者^[13,14]曾采用线性组合算符方法研究半导体中表面磁极化子和半导体膜中表面极化子的特性. 本文首次采用改进的线性组合算符法研究半导体抛物量子点中极化子的性质.

2 理论与计算

因电子在一个方向(设为 z 方向)比另外两个方向的受限强得多, 所以只考虑电子在 xoy 平面上运动. 设在单一半导体量子点中的束缚势为抛物形势

$$V(\rho) = \frac{1}{2}m\alpha\delta\rho^2 \quad (1)$$

* 国家自然科学基金资助项目(批准号: 10347004)

肖景林, 男, 1939 年出生, 教授, 目前主要从事晶体和半导体表面、界面物理的研究.
2003-11-04 收到, 2003-12-24 定稿

其中 m 为带能量; ρ 为二维坐标矢量; ω 为量子点在 xoy 平面的特征频率, 并定义为量子点的受限强度. 电子-声子体系的哈密顿量为:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2 + \sum_q \hbar\omega_{\lambda,0}b_q^\dagger b_q + \sum_q [V_q \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})b_q + h.c.] \quad (2)$$

b_q^\dagger (b_q) 为波矢为 \mathbf{q} 的体纵光学声子的产生(湮灭)算符, $\mathbf{r} = (\rho, z)$ 为电子坐标, 且

$$V_q = i \frac{\hbar\omega_{\lambda,0}}{q} \left[\frac{\hbar}{2m\omega_{\lambda,0}} \right]^{1/4} \left[\frac{4\pi\alpha}{V} \right]^{1/2} \quad (3)$$

$$\alpha = \left[\frac{e^2}{2\hbar\omega_{\lambda,0}} \right] \left[\frac{2m\omega_{\lambda,0}}{\hbar} \right]^{1/2} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right] \quad (4)$$

进行两次么正变换:

$$U_1 = \exp \left[-iA \sum_q \hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} b_q + b_q \right] \quad (5)$$

$$U_2 = \exp \left[\sum_q (b_q^\dagger f_q + b_q f_q^*) \right]$$

其中 A 是表征电子-LO 声子耦合强度的物理量; f_q (f_q^*) 是变分参量. 对电子在 xoy 平面运动的动量和坐标引进线性组合算符:

$$P_j = \left[\frac{m\hbar\lambda}{2} \right]^{1/2} (a_j + a_j^\dagger + P_{0j}) \quad (6)$$

$$\rho_j = i \left[\frac{\hbar}{2m\lambda} \right]^{1/2} (a_j - a_j^\dagger)$$

其中 λ 为变分参量, 则哈密顿量变为:

$$H' = H'_{//} + \frac{P_z^2}{2m} \quad (7)$$

$$H'_{//} = \frac{\hbar\lambda}{4} \sum_j (a_j^\dagger a_j^\dagger + a_j a_j + 2a_j^\dagger a_j + 1) + \frac{\hbar\lambda}{2} \sum_j (a_j + a_j^\dagger) P_{0j} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 - A \left[\frac{\hbar\lambda}{2m} \right]^{1/2} \times \sum_q (b_q^\dagger + f_q^*) (b_q + f_q) \sum_j (a_j + a_j^\dagger + P_{0j}) \hbar q_j + \sum_q \left[\frac{A^2 \hbar^2 q^2}{2m} + \hbar\omega_{\lambda,0} \right] (b_q^\dagger + f_q^*) (b_q + f_q) + \sum_q \left[V_q (b_q + f_q) \exp[i(1-A)q_j z] \times \exp \left[-\frac{(1-A)^2 \hbar q^2}{4m\lambda} \right] \exp \left[\sum_j \left[\frac{\hbar}{2m\lambda} \right]^{1/2} q_j a_j \right] \times \exp \left[-\sum_j \left[\frac{\hbar}{2m\lambda} \right]^{1/2} q_j a_j^\dagger \right] + h.c. \right] + \frac{\hbar\omega_0^2}{4\lambda} \sum_j (2a_j^\dagger a_j + 1 - a_j^\dagger a_j^\dagger - a_j a_j) + \frac{A^2 \hbar^2}{2m} \sum_{q \neq q'} (b_q^\dagger + f_q^*) (b_{q'}^\dagger + f_{q'}^*) \times (b_q + f_q) (b_{q'} + f_{q'}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' \quad (8)$$

其中(8)式中最后一项为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, 将其忽略.

令基态波函数为:

$$|\Psi\rangle = |\mathcal{Q}(z)\rangle |0\rangle_b |0\rangle_a \quad (9)$$

其中 $|\mathcal{Q}(z)\rangle$ 为电子 z 方向的波函数; $|0\rangle_b$ 为零声子态; $|0\rangle_a$ 为极化子的基态. 由 $b_q |0\rangle_b = 0$, $a_j |0\rangle_a = 0$ 确定.

系统在 xoy 平面的总动量为:

$$\mathbf{P}_{//T} = \mathbf{P}_{//} + \sum_q b_q^\dagger b_q \hbar\mathbf{q}_{//} \quad (10)$$

计算 $U_2^{-1} U_1^{-1} (H_{//} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{u}) U_1 U_2$ 对态 $|0\rangle_b |0\rangle_a$ 的平均值, 其中 \mathbf{u} 为拉格朗日乘子.

$F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, A, f_q)$

$$= {}_a \langle 0 | {}_b \langle 0 | U_2^{-1} U_1^{-1} (H_{//} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{u} U_1 U_2) | 0 \rangle_b | 0 \rangle_a$$

$$= \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 - A \left[\frac{\hbar\lambda}{2m} \right]^{1/2} \sum_{q,j} |f_q|^2 \hbar q_j P_{0j} + \sum_q \left[\frac{A^2 \hbar^2 q^2}{2m} + \hbar\omega_{\lambda,0} \right] |f_q|^2 + \sum_q \left[V_q f_q \exp[i(1-A)q_j z] \times \exp \left[-\frac{(1-A)^2 \hbar q^2}{4m\lambda} \right] + h.c. \right] + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} - \left[\frac{m\hbar\lambda}{2} \right]^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 - \sum_q (1-A) \hbar |f_q|^2 \mathbf{u} \cdot \mathbf{q} \quad (11)$$

上式对 f_q 变分可得 f_q , 再代入(11)式, 可得:

$F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, A) =$

$$\frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} - \left[\frac{m\hbar\lambda}{2} \right]^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 - \sum_q \frac{|V_q|^2 \exp \left[-\frac{(1-A)^2 \hbar q^2}{2m\lambda} \right]}{\hbar\omega_{\lambda,0} + \frac{A^2 \hbar^2 q^2}{2m} - A \left[\frac{\hbar\lambda}{2m} \right]^{1/2} \hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_0 - (1-A) \hbar \mathbf{u} \cdot \mathbf{q}} \quad (12)$$

3 弱耦合和强耦合情形

下面分别按强耦合和弱耦合两种极限情形进行讨论.

3.1 弱耦合情形

么正变换 U_1 中, $A = 1$ 对应弱耦合极限情形, (12)式变为:

$F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda) =$

$$\frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} - \left[\frac{m\hbar\lambda}{2} \right]^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 -$$

$$\sum_q \frac{|V_q|^2}{\hbar\omega_{\text{LO}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \left| \frac{\hbar\lambda}{2m} \right|^{1/2} \hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_0} \quad (13)$$

(13) 式最后一项求和变积分, F 对 \mathbf{P}_0, λ 变分可得

$$F(u) = \hbar\omega - \alpha\hbar\omega_{\text{LO}} - \frac{\frac{1}{2}m^*u^2}{1 - \frac{\alpha}{6}} \quad (14)$$

$$\lambda = \omega \quad (15)$$

电子在 xoy 平面内动量的平均值为:

$$\bar{P}_{//} = \frac{m}{1 - \alpha/6} u^2 \quad (16)$$

由于拉格朗日乘子 u 是极化子在 xoy 平面内的平均速度, 极化子的有效质量为:

$$m^* = \frac{m}{1 - \alpha/6} \quad (17)$$

量子点中弱耦合极化子的有效哈密顿量表示为:

$$H_{\text{eff}} = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{P_{//}^2}{2m^*} - \alpha\hbar\omega_{\text{LO}} + \hbar\omega \quad (18)$$

上式中前两项为量子点中极化子的动能, 第三和第四项为极化子相互作用能.

3.2 强耦合情形

么正变换 U_1 中 $A = 0$ 对应于强耦合极限情形, (12) 式变为:

$$F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda) = \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 + \frac{\hbar\omega_{\text{LO}}^2}{2\lambda} - \left[\frac{m\hbar\lambda}{2} \right]^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 - \sum_q \frac{|V_q|^2 \exp\left[-\frac{\hbar q^2}{2m\lambda}\right]}{\hbar\omega_{\text{LO}} - \hbar\mathbf{u} \cdot \mathbf{q}} \quad (19)$$

将 (19) 式最后一项求和变积分, F 对 \mathbf{P}_0 求变分可得出 \mathbf{P}_0 , 再代入 (19) 式可得:

$$F(u, \lambda) = \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_{\text{LO}}^2}{2\lambda} - \frac{1}{2}m \left[1 + \frac{2\alpha}{3} \frac{\left(\frac{\lambda}{\omega_{\text{LO}}}\right)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \right] u^2 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha\hbar\omega_{\text{LO}} \left(\frac{\lambda}{\omega_{\text{LO}}}\right)^{1/2} \quad (20)$$

电子在 xoy 平面内的动量平均值为:

$$\bar{P}_{//} = m \left[1 + \frac{2\alpha}{3} \frac{\left(\frac{\lambda}{\omega_{\text{LO}}}\right)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \right] u \quad (21)$$

极化子的有效质量为:

$$m^* = m \left[1 + \frac{2\alpha}{3} \frac{\left(\frac{\lambda}{\omega_{\text{LO}}}\right)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \right] \quad (22)$$

量子点强耦合极化子的有效哈密顿量为:

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} \quad (23)$$

其中

$$H_{\text{kin}} = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{P_{//}^2}{2m^*} \quad (24)$$

$$H_{\text{int}} = \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_{\text{LO}}^2}{2\lambda} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha\hbar\omega_{\text{LO}} \left(\frac{\lambda}{\omega_{\text{LO}}}\right)^{1/2} \quad (25)$$

分别为量子点强耦合极化子的动能和相互作用能,

(25) 式对 λ 的变分, $\frac{\partial H_{\text{int}}}{\partial \lambda} = 0$, 可以求出极化子的振动频率 λ 满足的方程为:

$$\lambda^2 - \alpha \sqrt{\frac{\omega_{\text{LO}}}{\pi}} \lambda^{3/2} - \omega_{\text{LO}}^2 = 0 \quad (26)$$

由 (22), (25) 和 (26) 式不难看出, 半导体抛物量子点中强耦合极化子的振动频率 λ 、相互作用能 H_{int} 和有效质量 m^* 不仅与 LO 声子的频率 ω_{LO} , 电子-声子耦合强度 α 有关, 而且还与量子点的受限强度 ω 有关.

4 数值计算和讨论

为了更清楚地说明受限强度和电子-声子耦合强度对半导体抛物量子点中强耦合极化子性质的影响, 选择 RbCl 材料进行数值计算. 所用材料的参数为^[15]: $\epsilon_0 = 4.92$, $\epsilon_\infty = 2.20$, $\hbar\omega_{\text{LO}} = 21.45\text{meV}$, $\alpha = 6.3$, $\omega_{\text{LO}} = 3.26 \times 10^{13}\text{s}^{-1}$. 数值结果示于图 1~ 6 中, 图 1 和 2 分别表示了 RbCl 晶体中, 抛物量子点中强耦合极化子的振动频率 λ 与受限强度 ω 的关系和极化子的有效质量 m^*/m 与振动频率 λ 的关系. 图 1 和 2 表明, 随着量子点受限强度的增加, 极化子的振动频率迅速加快, 有效质量迅速增大. 这是由于量子点限定势(抛物势)的存在, 限制了电子的运动. 随着限定势(ω)的增加, 即 ρ 的减少, 以声子为媒介的电子热运动能量和电子-声子之间相互作用由于粒子运动范围缩小而增强, 导致极化子振动频率加快和有效质量增大, 使其表现出新奇的量子尺寸效应. 图 3 表示在 RbCl 晶体中抛物量子点强耦合极化子的相互作用能 H_{int} 与受限强度 ω 的变化关系, 由图可以看出, 随受限强度 ω 的增加, 极化子的相互作用能 H_{int} 先急剧增加, 当 $\omega = 2.19 \times 10^{14}\text{s}^{-1}$ 时, 相互作用能达到极大值 ($H_{\text{intmax}} = -152.48\text{meV}$), 然后随受限强度的增加而急剧地减少, 极化子的相互作用能 H_{int} 随受限强度的变化表现出共振的特性, 合适的限定势(ω) 有利于量子点

中极化子的稳定.

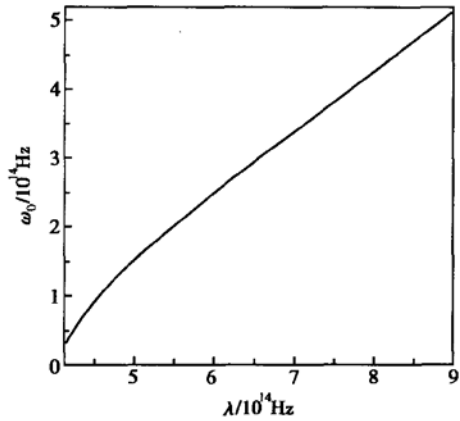


图 1 RbCl 晶体中 ω_0 与 λ 的关系

Fig. 1 Relation between ω_0 and λ in the RbCl crystal

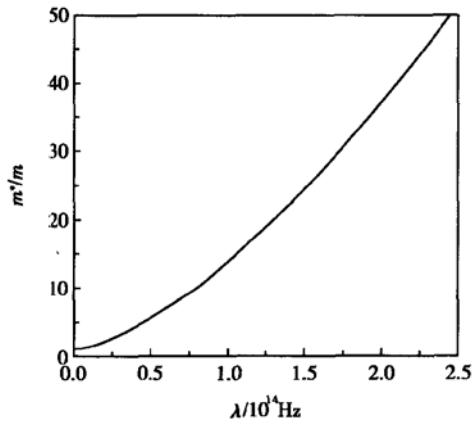


图 2 RbCl 晶体中 m^*/m 与 λ 的关系

Fig. 2 Relation between m^*/m and λ in the RbCl crystal

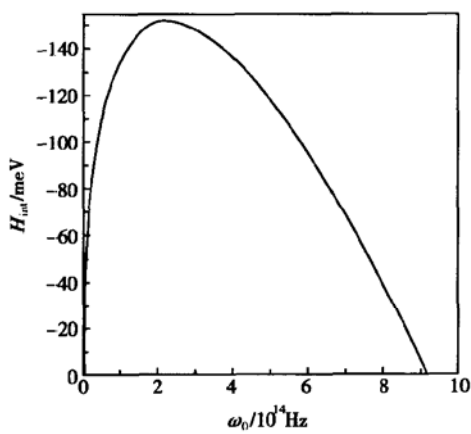


图 3 RbCl 晶体中 H_{int} 与 ω_0 的关系

Fig. 3 Relation between H_{int} and ω_0 in the RbCl crystal

图 4, 5 和 6 分别表示对于不同的电子-声子耦合强度 α 极化子的振动频率 λ 与受限强度 ω_0 、有效

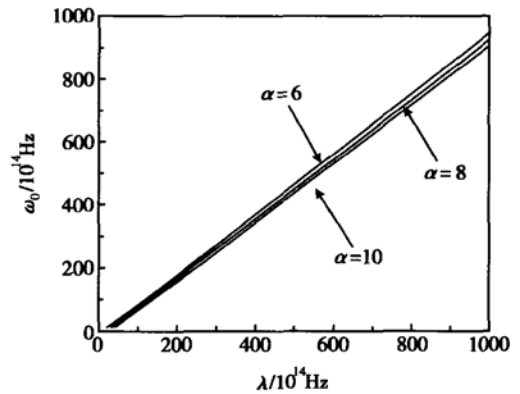


图 4 对于不同的电子-声子耦合强度 α , λ 与 ω_0 的关系

Fig. 4 Relation between λ and ω_0 for the different coupling strength

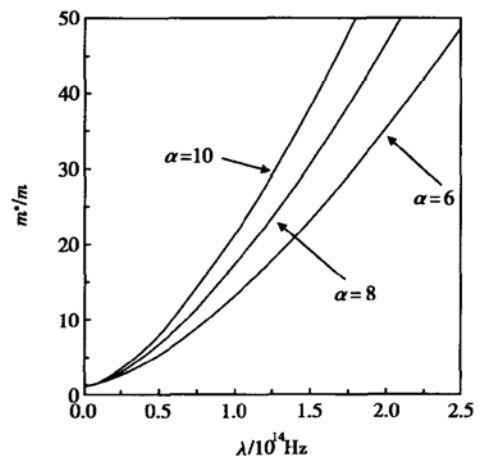


图 5 对于不同的电子-声子耦合强度 α , m^*/m 与 λ 的关系

Fig. 5 Relation between m^*/m and λ for the different coupling strength

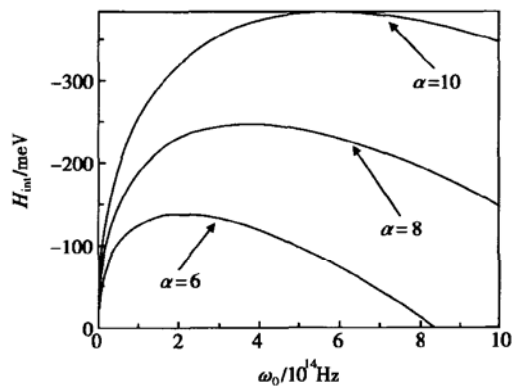


图 6 对于不同的电子-声子耦合强度 α , H_{int} 与 ω_0 的关系

Fig. 6 Relation between H_{int} and ω_0 for the different coupling strength

质量 m^*/m 与振动频率 λ 和相互作用能 H_{int} 与受限强度 ω 的变化曲线. 由图可以看出, 在一定的限定势 (ω 取确定值) 下, 电子-声子耦合强度越大, 则极化子的相互作用能 H_{int} 和振动频率 λ 越大; 耦合强度 α 越大, 有效质量 m^*/m 也越大. 表明由于半导体量子点限定势的增大, 使量子点的极化加强, 所以半导体量子点的极化是不能忽略的.

参考文献

- [1] Zhu K D, Gu S W. Polaronic states in a harmonic quantum dot. *Phys Lett A*, 1992, 163: 435
- [2] Zhu K D, Gu S W. The polaron self-energy in a parabolic quantum dot. *Commun Theory Phys*, 1993, 29: 27
- [3] Zhou H Y, Gu S W. Size dependence of phonon modes in a rectangular quantum dot. *Solid State Commun*, 1993, 86: 403
- [4] Mukhopadhyay S, Chatterjee A. Path-integral approach for electron-phonon interaction effects in harmonic quantum dots. *Int J Mod Phys B*, 1996, 10: 2781
- [5] Lepine Y, Bruneau G. The effect of an anisotropic confinement on the ground-state energy of a polaron in a parabolic quantum dot. *J Phys Condens Matter*, 1998, 10: 1495
- [6] Mukhopadhyay S, Chatterjee A. Relaxed and effective-mass excited states of a quantum-dot polaron. *Phys Rev*, 1998, B58: 2088
- [7] Hirose K, Wingreen N S. Spin-density-functional theory of circular and elliptical quantum dots. *Phys Rev*, 1999, B59: 4604
- [8] Charrou R, Bouhassoune M, Bria D, et al. Polaron effect on the binding energy of shallow donor in cylindrical quantum dot. *Acta Phys Pol A*, 1999, 96: 759
- [9] Li X Q, Arakawa Y. Confined optical phonons in semiconductor quantum dots. *Solid State Commun*, 1999, 109: 351
- [10] Es-Sbai, Fliyou M, Abarkan E. Impurity bound polaron in a cubic quantum dot. *Phys Low-Dimens Struct*, 2000, 11/12: 61
- [11] Cantele G, Ninno D, Iabonisi G. Calculation of the infrared optical transitions in semiconductor ellipsoide quantum dots. *Nano Lett*, 2001, 1: 123
- [12] Xie W F. Polaron effect on D-centers in a quantum dot. *Journal of Guangzhou University*, 2002, 1: 22
- [13] Xiao J L, Eerdunchaolu, Zhang P. Properties of surface magnetopolaron in CdF₂ semiconductor. *Chinese Journal of Semiconductors*, 1999, 20(6): 441(in Chinese) [肖景林, 额而敦朝鲁, 张鹏. CdF₂ 半导体表面磁极化子的性质. *半导体学报*, 1999, 20(6): 441]
- [14] Eerdunchaolu, Li S S, Xiao J L. 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) [额而敦朝鲁, 李树深, 肖景林. 晶格振动对极化子半导体膜中电子-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]
- [15] Kartheuser E. Dielectric properties of polar crystals polarons in ionic crystals and polar semiconductors(M). Antwerp Advanced Study Institute 1971 on Fronlich Polarons and Electron-Phonon Interaction in Polar Semiconductor (Amsterdam: North-Holland), 1972: 721

Effective Mass of Polaron in Semiconductor Quantum Dots*

Xiao Jinglin¹ and Xiao Wei²

(1 Department of Physics, Inner Mongolia National University, Tongliao 028043, China)

(2 Basic Department, Beijing Informational Engineering College, Beijing 100101, China)

Abstract: The properties of the effective mass of polaron in semiconductor quantum dot are studied. The relations between the vibration frequency, the interaction energy and the effective mass of the polaron at the electron-LO phonon strong coupling in parabolic quantum dot with the confinement strength and the electron-phonon coupling strength are derived by using an improved liner combination operator method. Numerical calculations for RbCl crystal are performed and the results show that the vibration frequency and the effective mass will increase with the confinement strength increasing. Whereas the interaction energy is harshly increased until the confinement strength reaches a certain value, then it will sharply decrease.

Key words: semiconductor quantum dot; polaron; bound power; effective mass

PACC: 6320; 7138

Article ID: 0253-4177(2004)11-1428-05

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

Xiao Jinglin male, was born in 1939, professor. He is engaged in research on surface and interface physics in crystals and semiconductors.

Received 4 November 2003, revised manuscript received 24 December 2003

© 2004 The Chinese Institute of Electronics