

声子和磁场对量子环中极化子性质的影响^{*}

赵翠兰[†] 高宽云

(内蒙古民族大学物理与电子信息学院, 通辽 028043)

(2009 年 9 月 24 日收到; 2009 年 11 月 12 日收到修改稿)

采用求解能量本征方程、么正变换和变分相结合的方法, 研究声子和磁场对量子环中极化子性质的影响. 对 KBr 量子环的数值计算表明, 电子或极化子的基态能量随量子环频率(或平均半径)的增大而增大, 极化子基态能移随量子环频率的增大(或平均半径的减小)而减小, 极化子中的平均声子数随量子环频率的增大(或平均半径的减小)而增大. 当有垂直磁场时, 极化子基态能量和基态能移与外磁场及电子转动状态有关. 随着磁场强度的增大, 基态能量出现简并且呈现非周期性振荡; 能移随磁场强度的增大(或转动量子数绝对值的减小)而减小.

关键词: 量子环, 极化子, 能态, 能移

PACC: 6320K, 7138

1. 引 言

随着分子束外延(MBE)和金属有机化合物气相沉积(MOCVD)等技术的发展, 人们已经能够制备出量子点、量子线和量子环等各种各样的纳米结构. 这些纳米结构由于三维受限, 具有许多不同于体材料的量子特性, 因此引起人们极大的关注. 特别是近年来, 许多学者对纳米结构中电子与声子之间的相互作用进行了研究^[1-3]. Stauber 等^[4]利用平均场理论研究了量子点中与光学声子和声学声子相关的极化子弛豫. Harouni 等^[5]研究了声子对球形量子点光学性质的影响. 吴卓杰等^[6]利用正则变换方法研究了电声子相互作用对量子点分子中单电子隧穿的影响, 详细分析了电声子耦合引起的退相干问题. 马玉彬^[7]采用脉冲激光沉积技术研究了薄膜晶格结构和电输运行行为, 结果表明在居里温度以上的高温顺磁性与绝热小极化子模型一致, 并且对制备好的晶样, 多晶样品的电输运行行为也能表现出本征的小极化子性质. 余超凡等^[8]采用压缩-相干态方法研究一维分子晶体中电子-双声子相互作用对极化子-孤子系统基态性质和量子涨落的影响, 结果表明仅当电子-双声子耦合强度小于零时, 非线性方程才有孤波解, 此时声子量子涨落效应随着压

缩增加, 极化子-孤子系统的基态更负. 侯俊华等^[9]推导了二维电子-体声学声子相互作用的哈密顿量, 并用变分法计算了二维声学极化子的基态能. 刘云飞等^[10]采用求密度矩阵元的方法, 研究了声学声子对激子量子比特纯退相干的影响.

量子环作为一种三维受限的纳米结构, 最显著的拓扑特征是中间有一个圆孔, 从而产生了许多独特的光学、磁学和电学特性. 因此, 量子环已经成为近些年来研究的热点^[11-13]. Li 等^[14, 15]用有效质量包络函数理论研究了三维 InAs/GaAs 量子环的电子态. Filikhin 等^[16, 17]在能量依赖有效质量近似下, 用有限元方法研究三维量子环的电子态, 并分析量子环形状和尺寸对电子能态和有效质量的影响. Bruno-Alfonso 等^[18]采用曲线坐标系中求解薛定谔方程的方法, 研究了任意形状和非均匀宽度的量子环中的电子态. 我们通过求解能量本征方程、么正变换和变分相结合的方法研究了量子环中量子比特的性质以及声子对量子比特性质的影响^[19, 20]. 本文将在抛物限制势下采用同样方法研究声子和磁场对量子环中极化子性质的影响.

2. 理论计算

设电子在与量子环平面垂直的方向上强受限, 仅在环平面内运动, 均匀磁场 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ 垂直于

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10964005)和内蒙古高校科研基金(批准号: NJzy08085)资助的课题.

[†] E-mail: nmdzcl@163.com

环平面. 则在有效质量和抛物限制势近似下, 电子-声子系统的哈密顿量为^[21]

$$H = H_e + H_{L0} + H_{e-L0}, \quad (1)$$

其中,

$$H_e = -\frac{\hbar}{2\mu} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i \frac{eB}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2} \rho^2 \right] + V(\rho), \quad (2)$$

$$V(\rho) = a_1 \rho^{-2} + a_2 \rho^2, \quad (3)$$

$$H_{L0} = \sum_q \hbar \omega_{L0} b_q^\dagger b_q, \quad (4)$$

$$H_{e-L0} = \sum_q D_q (b_q + b_q^\dagger) e^{iq \cdot r}, \quad (5)$$

$$D_q = \frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi \hbar \omega_{L0}}{\varepsilon^* v}} = \left(\frac{\hbar \omega_{L0}}{q} \right) \left(\frac{2\hbar}{\mu \omega_{L0}} \right)^{1/4} \left(\frac{2\pi \alpha}{v} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

这里 H_e , H_{L0} 和 H_{e-L0} 分别为电子、自由声子及电子-声子相互作用的哈密顿量. μ 为电子的有效质量, $\mathbf{r} = (\rho, \varphi, z)$ 为电子的位置矢量, b_q^\dagger (b_q) 是波矢为 \mathbf{q} 的声子的产生(湮没)算符, e 为电子的电荷, ε^* ($\varepsilon^{*-1} = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1}$) 为有效光学介电常数, ω_{L0} 为声子频率. α 为电子声子耦合常数, v 为晶体的体积. a_1 和 a_2 是特定的参数, 限制势 $V(\rho)$ 在 $\rho_0 = (a_1/a_2)^{1/4}$ 点有最小值 $V(\rho_0) = V_0$, ρ_0 定义为量子环的平均半径, $V(\rho)$ 在最小值附近的展开式是 $V(\rho) = V_0 + \frac{\mu \omega_0}{2} (\rho - \rho_0)^2$, 其中 $V_0 = 2 \sqrt{a_1 a_2}$. 据此可以得到特定参数 a_1 和 a_2 与实验可决定的参数 ρ_0 和 ω_0 之间的关系为 $\omega_0 = \sqrt{8a_2/\mu}$, $\rho_0 = (a_1/a_2)^{1/4}$, ω_0 为量子环的频率.

电子哈密顿量(2)的本征值和本征波函数为^[22]

$$E_{nm} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2} \right) \hbar \omega + \frac{m}{2} \hbar \omega_B$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots; m = \dots, -1, 0, 1, \dots), \quad (7)$$

$$\psi_{nm}(\rho, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\Gamma(n+M+1)}{2^{M+1} n! [\Gamma(M+1)]^2 \pi} \right)^{1/2} \times e^{-\frac{\rho^2}{4\lambda^2}} \left(\frac{\rho}{\lambda} \right)^M {}_1F_1 \left[-n, M+1, \frac{\rho^2}{2\lambda^2} \right] e^{im\varphi}, \quad (8)$$

其中 $\omega_B = \frac{eB}{\mu}$ 是电子的回旋共振频率, $\omega =$

$$\sqrt{\omega_B^2 + \omega_0^2}, \lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu \omega}}, M = \sqrt{m^2 + \frac{2a_1 \mu}{\hbar^2}}, {}_1F_1 \text{ 是合流}$$

超几何函数. 量子数 n 和 m 分别描述电子的径向运动和角运动. 能量以导带底为能量零点. 这里我们只限于讨论 $n = 0, m = -4, -3, -2, -1, 0, 1$ 的情况.

进行 LLP (Lee-Low-Pines) 么正变换

$$U = \exp \left[\sum_q (f_q b_q^\dagger - f_q^* b_q) \right], \quad (9)$$

其中位移振幅 f_q 是变分参量. 变换后的哈密顿量为

$$H^* = U^{-1} H U. \quad (10)$$

在低温极限下, 系统的尝试波函数取为

$$|\Phi\rangle = |\psi_{0m}(\rho, \varphi)\rangle |\phi(z)\rangle |0\rangle, \quad (11)$$

其中 $|\psi_{0m}(\rho, \varphi)\rangle$ 为极坐标平面内电子的波函数. 由于量子环在 z 方向受到比极坐标平面内更强的限制, 所以电子在 z 方向的波函数可设为 $|\phi(z)\rangle$, 满足条件 $|\phi(z)|^2 = \delta(z)$, $|0\rangle$ 为声子真空态, 满足 $b_q |0\rangle = 0$. 通过对能量期待值中的变分参量 f_q 求变分可得到极化子的能量为

$$E_{pm} = \min_{f_q} \{ \langle \Phi | H^* | \Phi \rangle \}, \quad (12)$$

在计算中已应用展开式

$$e^{iq \cdot r} = e^{iqlz} \sum_k i^k J_k(q_x \rho) e^{ik\varphi} \text{ (设极轴沿 } q_x \text{ 方向)}.$$

极化子的能移定义为

$$\Delta E_{pm} = E_{pm} - \langle \psi_{0m}(\rho, \varphi) | H_e | \psi_{0m}(\rho, \varphi) \rangle, \quad (13)$$

极化子中声子的平均数为

$$N = \langle \Phi_g | U^{-1} \sum_q b_q^\dagger b_q U | \Phi_g \rangle. \quad (14)$$

3. 数值计算结果和讨论

为清楚显示声子对量子环中极化子性质的影响, 设外磁场 $\mathbf{B} = 0$, 并选 KBr 材料为例进行数值计算. 具体参数如下^[23]: $\alpha = 3.05$, $\hbar \omega_{L0} = 20.97 \text{ meV}$, $\mu = 0.369 m_0$, m_0 是自由电子质量. 数值结果绘于图 1—图 4 中.

图 1 表示当量子环的平均半径取为确定值 $\rho_0 = 60 \text{ nm}$ 时, 量子环中电子基态能量 E_{00} 、极化子基态能量 E_g 以及极化子基态能移 ΔE_g 随频率 ω_0 的变化关系. 从图 1 中可以看出, 对于确定的 ρ_0 , E_{00} 和 E_g 均随频率的增大而增大, 而 ΔE_g 随频率的增大而减小. 其原因是随着频率的增大, a_1, a_2 及 $V(\rho)$ 增大, 电子受限增强, 所以电子能量增大, 进而导致极化子能量增大. 且随着频率增大, 声子数增多(如图 2 所示), 故声子能量及电子-声子相互作用增强, 导

致极化子基态能移减小(绝对值增大)。

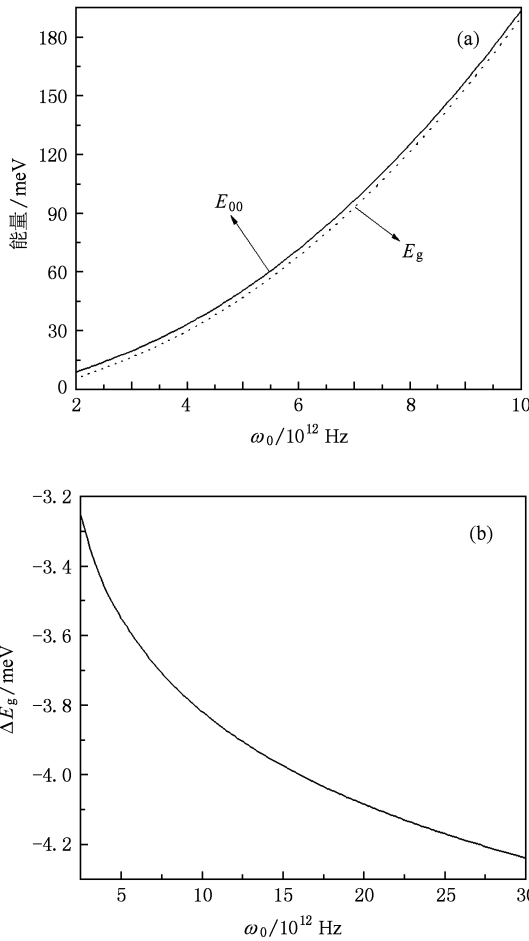


图1 量子环平均半径 $\rho_0 = 60$ nm 时,电子和极化子基态能量以及极化子基态能移随量子环频率 ω_0 的变化曲线 (a)电子和极化子基态能量随频率的变化,(b)极化子基态能移随频率的变化

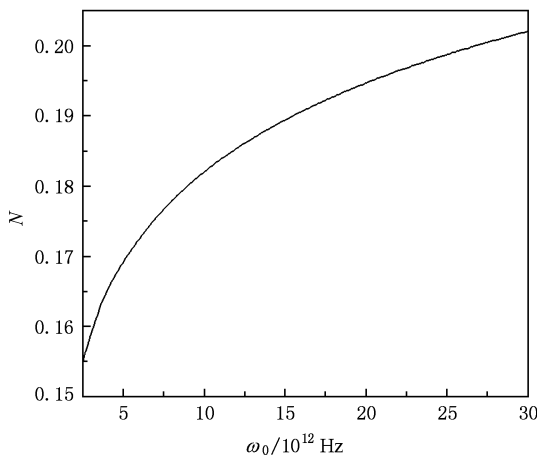


图2 量子环平均半径 $\rho_0 = 60$ nm 时,极化子基态中声子平均数随量子环频率 ω_0 的变化曲线

$\times 10^{12}$ Hz 时,量子环中电子基态能量 E_{00} 、极化子基态能量 E_g 以及极化子基态能移 ΔE_g 随平均半径 ρ_0 的变化关系. 可以看到,对于确定的频率, E_{00} 、 E_g 以及 ΔE_g 均随平均半径 ρ_0 的增大而增大. 原因是当频率给定时,随着平均半径的增大, a_1 和 $V(\rho)$ 增大,电子受限增强,导致电子基态能量和极化子基态能量增大. 且随着平均半径的增大,声子数减少(如图4所示),故声子能量及电子-声子相互作用减弱,导致极化子基态能移增大(绝对值减小)。

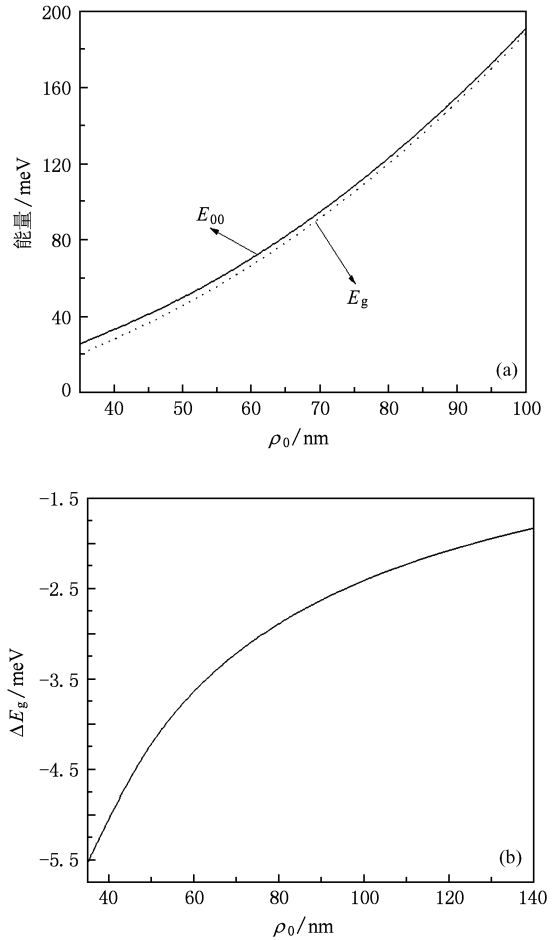


图3 量子环频率 $\omega_0 = 6.0 \times 10^{12}$ Hz 时,电子和极化子的基态能量以及极化子基态能移随量子环平均半径 ρ_0 的变化曲线 (a)电子和极化子的基态能量随平均半径的变化,(b)极化子基态能移随平均半径的变化

结合图1与图3,可以发现对于相同的频率和平均半径,量子环中极化子的基态能量要低于电子的基态能量,这表明声子效应使极化子的能量降低. 还可以看到,极化子和电子的基态能量随量子环的频率和平均半径的变化趋势相同,这是由于自由声子能量和电子声子相互作用能之和远小于电

图3 表示当量子环的频率取为确定值 $\omega_0 = 6.0$

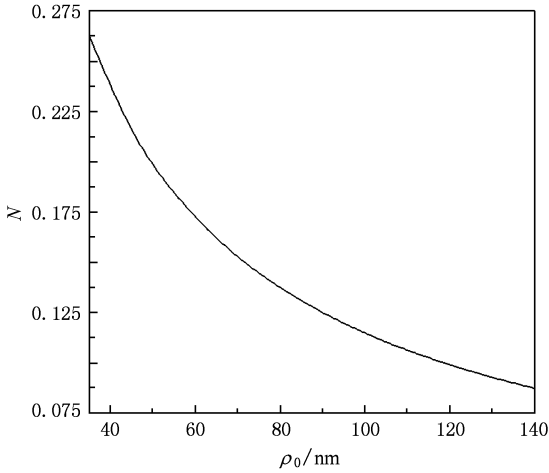


图4 量子环频率 $\omega_0 = 6.0 \times 10^{12}$ Hz 时,极化子基态中声子平均数随平均半径 ρ_0 的变化曲线

子的基态能量,所以电子与极化子基态能量随量子环的频率和平均半径变化的总趋势一致.

若将图3与文献[19]或[24]比较还可以看出,量子环中电子能量或极化子能量随量子环半径变化的规律与选择无限深势阱时的变化规律相同,即受限愈强,能量愈大.

为清楚显示均匀磁场对量子环中极化子性质的影响,我们仍选KBr材料为例进行数值计算,参数和无磁场时相同,且选择量子环的尺寸满足 $\hbar\omega_0 = 12\hbar^2/2\mu\rho_0^2$, $\omega_0 = 6.0 \times 10^{12}$ Hz. 能量和能移以 $\hbar\omega_0$ 为单位,回旋频率以 ω_0 为单位. 数值结果见图5和图6.

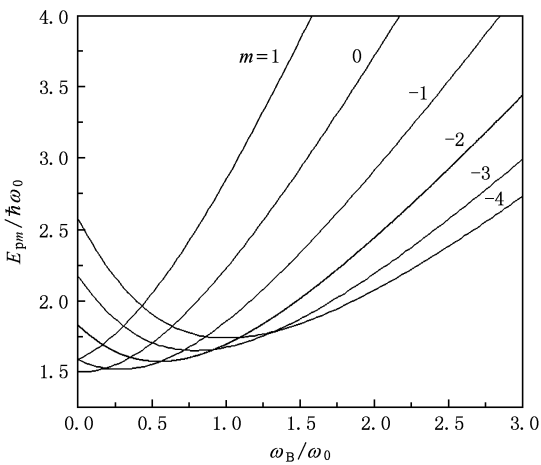


图5 量子环中极化子的能量 E_{pm} 随电子的回旋频率 ω_B 的变化曲线

图5表示量子环中极化子的能量 E_{pm} 随电子的回旋频率 ω_B 的变化曲线. 由图5可见,当 $n=0$ 时,

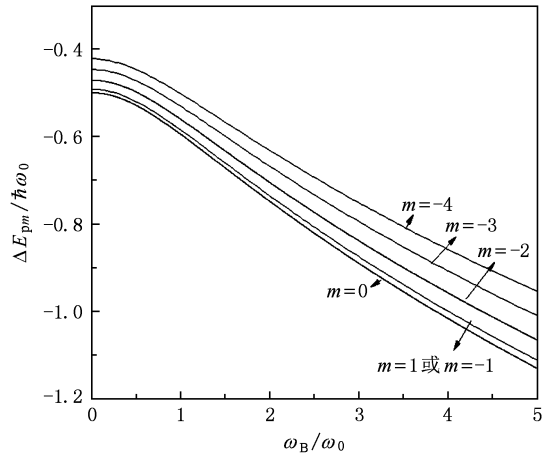


图6 量子环中极化子的能移 ΔE_{pm} 随电子的回旋频率 ω_B 的变化曲线

极化子的能量 E_{pm} 与回旋频率 ω_B 及描述电子转动状态的量子数 m 有关. 当回旋频率 ω_B 给定时, E_{pm} 随量子数 m 的变化而变化; 当量子数 m 给定时, E_{pm} 随回旋频率 ω_B 的变化而变化, 在 $\frac{\partial E_{pm}}{\partial \omega_B} = 0$ 处出现最小值. 具有不同量子数 m 的能态的最小值不同, 导致具有不同量子数 m 的能级发生交叉. 结果为, 随着磁场强度的增大, 基态由量子数为 $m=0$ 的态向 $m=-1, -2, -3, \dots$ 的态转移, 基态能量出现简并且呈现非周期性振荡.

图6表示量子环中极化子的能移 ΔE_{pm} 随电子的回旋频率 ω_B 的变化曲线. 由图6可知, 能移由回旋频率 ω_B 和转动量子数的绝对值 $|m|$ 决定. 当 $|m|$ 给定时, 随着回旋频率 ω_B 的增大, 能移减小, 而相邻 $|m|$ 的能移差增大; 当回旋频率 ω_B 给定时, 能移随 $|m|$ 的增大而增大 (绝对值减小). 究其原因, 极化子能移是由于声子运动、磁场与声子以及电子与声子之间的相互作用所致.

4. 结 论

应用求解能量本征方程、LLP 么正变换和变分相结合的方法研究了无磁场时量子环中电子基态能量、极化子基态能量和极化子基态能移对量子环频率和平均半径的依赖关系, 以及存在均匀磁场时, 量子环中极化子能量和能移对磁场的依赖关系. 结果表明: 无磁场时, 电子基态能量和极化子基态能量随量子环频率 (或平均半径) 的增大而增大, 极化子基态能移随量子环频率的增大 (或平均半径

的减小)而减小,极化子中的平均声子数随量子环频率的增大(或平均半径的减小)而增大. 存在均匀磁场时,极化子能量与磁场强度和电子的转动状态有关. 随着磁场强度的增大,极化子基态由转动量

子数为 $m = 0$ 的态向 $m = -1, -2, -3, \dots$ 的态转移,基态能量出现简并且呈现非周期性振荡. 极化子能移由磁场强度和转动量子数绝对值 $|m|$ 决定,能移随磁场强度的增大(或 $|m|$ 的减小)而减小.

-
- [1] Zhang Y F, Jia J F, Han T Z, Tang Z, Shen Q T, Guo Y, Xue Q K 2005 *Chin. Phys.* **14** 1910
- [2] Liu X J, Gao K, Li Y, Wei J H, Xie S J 2007 *Chin. Phys.* **16** 2091
- [3] Oliveira B P W, Haas S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 155102
- [4] Stauber T, Vasilevskiy M I 2009 *Phys. Rev. B* **79** 113301
- [5] Harouni M B, Roknizadeh R, Naderi M H 2009 *Phys. Rev. B* **79** 165304
- [6] Wu Z J, Zhu K D, Yuan X Z, Zheng H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3346 (in Chinese) [吴卓杰、朱卡的、袁晓忠、郑杭 2005 物理学报 **54** 3346]
- [7] Ma Y B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4901 (in Chinese) [马玉彬 2009 物理学报 **58** 4901]
- [8] Yu C F, Liang G D, Cao X J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4402 (in Chinese) [余超凡、梁国栋、曹锡金 2008 物理学报 **57** 4402]
- [9] Hou J H, Liang X X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3059
- [10] Liu Y F, Xiao J L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3324 (in Chinese) [刘云飞、肖景林 2008 物理学报 **57** 3324]
- [11] Lee B C, Voskoboinikov O, Lee C P 2004 *Physica E* **24** 87
- [12] Castelano L K, Hai G Q, Partoens B, Peeters F M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 195315
- [13] Liu Y M, Huag G M, Shi T Y 2008 *Phys. Rev. B* **77** 115311
- [14] Li S S, Xia J B 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 3434
- [15] Li S S, Xia J B 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 3227
- [16] Filikhin I, Deyneka E, Melikyan H, Vlahovic B 2005 *Mol. Simulat.* **31** 779
- [17] Filikhin I, Suslov V M, Vlahovic B 2006 *Physica E* **33** 349
- [18] Bruno-Alfonso A, Latge A 2008 *Phys. Rev. B* **77** 205303
- [19] Gao K Y, Zhao C L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4446 (in Chinese) [高宽云、赵翠兰 2008 物理学报 **57** 4446]
- [20] Jiang F S, Zhao C L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6786 (in Chinese) [姜福仕、赵翠兰 2009 物理学报 **58** 6786]
- [21] Kovalev V M, Chaplik A V 2005 *J. Exp. Theor. Phys.* **101** 686
- [22] Tan W C, Inkson J C 1996 *Phys. Rev. B* **53** 6947
- [23] Oshiro K, Akai K, Matsuura M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 7986
- [24] Jiang F S 2009 *MS Thesis* (Tongliao: Inner Mongolia University for the Nationalities) (in Chinese) [姜福仕 2009 硕士学位论文(通辽: 内蒙古民族大学)]

Influence of phonon and magnetic field on property of polaron in quantum ring^{*}

Zhao Cui-Lan[†] Gao Kuan-Yun

(College of Physics and Electronic Information, Inner Mongolia University for Nationalities, Tongliao 028043, China)

(Received 24 September 2009; revised manuscript received 12 November 2009)

Abstract

The influence of phonon and magnetic field on property of polaron in quantum ring was studied by solving precisely the energy eigen-equation, unitary transformation and variational method. The numerical calculation for KBr quantum ring showed that the ground state energy of electron or polaron increases with increasing frequency (or the averaging radius) of the quantum ring, the polaron energy shift decreases with increasing frequency (or decreasing averaging radius) of the quantum ring, and the mean phonon number increases with increasing frequency (or decreasing averaging radius) of the quantum ring. When a perpendicular magnetic field is present, the energy levels of the polaron may cross, the ground state changes from the state with $m = 0$ to that with $m = -1, -2, -3, \dots$, and the ground state energy makes non-periodical oscillation with increasing magnetic field strength; the polaron energy shift decreases with increasing magnetic field strength (or absolute value of quantum number $|m|$).

Keywords: quantum ring, polaron, energy state, energy shift

PACC: 6320K, 7138

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10964005) and the Scientific Research Foundation of Higher University of Inner Mongolia, China (Grant No. NJzy08085).

[†] E-mail: nmdzcl@163.com