# 物理学报 Acta Physica Sinica



Rashba 自旋-轨道耦合下二维双极化子的 基态性质

乌云其木格 辛伟 额尔敦朝鲁

Properties of the ground state of two-dimensional bipolaron with Rashba spin-orbit coupling

Wuyunqimuge Xin Wei Eerdunchaolu

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 65, 177801 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.177801 在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.177801 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I17

您可能感兴趣的其他文章 Articles you may be interested in

#### 脉冲激光原位辐照对InAs/GaAs(001)量子点生长的影响

Effects of in-situ surface modification by pulsed laser on InAs/GaAs (001) quantum dot growth 物理学报.2016, 65(11): 117801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.117801

#### 利用N型半导体纳米材料抑制单量子点的荧光闪烁特性

Suppression of the blinking of single QDs by using an N-type semiconductor nanomaterial 物理学报.2015, 64(24): 247803 http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.247803

Rashba 自旋-轨道相互作用影响下量子盘中强耦合磁极化子性质的研究

Study of the properties of strong-coupling magnetopolaron in quantum disks induced by the Rashba spinorbit interaction

物理学报.2014, 63(17): 177803 http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.177803

#### 等离子体增强InAs单量子点荧光辐射的研究

Photoluminescence from plasmon-enhanced single InAs quantum dots 物理学报.2014, 63(2): 027801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.027801

计及激子-双激子相干下半导体单量子点中的空间光孤子砥

Spatial optical soliton pairs in a quantum dot with exciton-biexciton coherence 物理学报.2013, 62(14): 147801 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.147801

# Rashba自旋-轨道耦合下二维双极化子的 基态性质\*

乌云其木格<sup>1)</sup> 辛伟<sup>2)</sup> 额尔敦朝鲁<sup>2)†</sup>

(内蒙古民族大学物理与电子信息学院,通辽 028043)
 2)(河北科技师范学院物理系,秦皇岛 066004)
 (2016年4月4日收到;2016年5月24日收到修改稿)

在考虑 Rashba 自旋-轨道耦合效应下, 基于 Lee-Low-Pines 变换, 采用 Pekar 型变分法研究了量子点中双 极化子的基态性质.数值结果表明,在电子-声子强耦合 (耦合常数 $\alpha > 6$ )条件下,量子点中形成稳定双极化 子结构的条件 (结合能  $E_b > 0$ )自然满足;双极化子的结合能  $E_b$ 随量子点受限强度 $\omega_0$ 、介质的介电常数比 $\eta$ 和电子-声子耦合强度 $\alpha$ 的增大而增加,随 Rashba 自旋-轨道耦合常数 $\alpha_R$ 的增加表现为直线增加和减小两种截然相反的情形; Rashba 效应使双极化子的基态能量分裂为 $E(\uparrow\uparrow), E(\downarrow\downarrow)$ 和 $E(\uparrow\downarrow)$ 三条能级,分别对应两 电子的自旋取向为"向上"、"向下"和"反平行"三种情形;基态能量的绝对值 |E|随 $\eta$ 和 $\alpha$ 的增加而增大,随  $\alpha_R$ 的增加表现为直线增加和减小两种截然相反的情形;在双极化子的基态能量 E中,电子-声子耦合能所占 据的比例明显大于 Rashba 自旋-轨道耦合能所占比例,但电子-声子耦合与 Rashba 自旋-轨道耦合间相互渗透、彼此影响显著.

关键词: 窄禁带 II-VI 族异质结, 双极化子, Rashba 自旋-轨道耦合, 基态能量
 PACS: 78.67.Hc, 71.38.-k, 71.38.Mx
 DOI: 10.7498/aps.65.177801

### 1引言

由于在半导体异质结中存在结构反演不对称 性,导致电子的自旋简并解除,在没有外加磁场 情况下,费米面处电子发生Rashba自旋-轨道分 裂<sup>[1,2]</sup>.虽然在极性半导体异质结中还存在体反演 不对称性引起的电子自旋分裂,但是对于窄禁带半 导体而言,电子的自旋分裂主要是由结构反演不 对称性引起的<sup>[3]</sup>.早期,对Rashba自旋-轨道分裂 的研究大多都集中在III-V族半导体材料中<sup>[4-7]</sup>; 后来,理论研究表明,由于Rashba自旋-轨道耦合 是一种涉及原子的相互作用,原子量大的材料,如 Hg基II-VI族材料,将会存在更强的自旋-轨道耦 质结中电子具有更高的Rashba自旋分裂能量(约10 meV)<sup>[10]</sup>和更大的应用空间;近年来,窄禁带 II-VI族异质结中Rashba自旋-轨道耦合的课题也 受到了实验工作者的更多关注<sup>[11]</sup>.

半导体器件制造工艺的发展使得大量的低维 半导体器件成为现实.目前,研究自旋电子学的一 个重要分支就是在窄禁带半导体量子点或半导体 隧穿结等这样的介观系统模型上研究 Rashba 自旋 轨道耦合效应<sup>[12-15]</sup>.这是因为在窄禁带半导体的 纳米结构(量子阱、量子点等)中由于量子限制效 应、导带和价带之间的强相互作用及自旋-轨道耦 合的共同相互作用使得 Rashba 效应增大了.最近, 一些学者<sup>[16,17]</sup>对 Rashba 效应影响下量子点中极 化子的性质进行了研究.这主要是因为考虑到大多 数的纳米结构是离子晶体或极性材料制备的,电子

\* 河北省自然科学基金 (批准号: E2013407119) 和河北省高校科学技术研究项目 (批准号: ZD20131008, Z2015149, Z2015219) 资助 的课题.

†通信作者. E-mail: eerdunchaolu@163.com

© 2016 中国物理学会 Chinese Physical Society

-声子耦合强烈的影响着它们的物理性质<sup>[18]</sup>,同时, 在这些低维纳米系统中,自旋-轨道耦合作用很强, 而且耦合强度可以通过栅电压来调节和控制,因此 在利用半导体量子点等纳米材料制备量子器件时, 自旋对量子点中电子-声子耦合的影响不容忽略. 然而,人们对Rashba自旋-轨道耦合影响下量子 点中电子-声子相互作用的理论研究中,大多仅限 于讨论单极化子情形,这对III-V族半导体量子点 结构无疑是正确的. 但随着分子束外延等高新技术 的发展,近年来,II-VII族化合物材料被广泛注意. 不过,一般而言, II-VII族半导体材料中的电子-声 子耦合常数要比III-V族半导体材料中的电子-声 子耦合常数大一个数量级,而且在这类材料的量子 点结构中,因维度的降低,其电子-声子相互作用 变得更强(电子-声子耦合常数 $\alpha$  一般大于 6.0)<sup>[19]</sup>, 致使两个相同的电子通过声子场相互作用,很容易 形成双极化子的束缚态<sup>[20,21]</sup>.毫无疑问,对这类 材料的量子点结构而言,抑制双极化子的形成既 无可能也无必要,在研究其电子-声子相互作用和 Rashba 自旋-轨道耦合时, 选取双极化子作为元激 发要比单极化子更精准、更有实际意义和潜在的应 用价值. 然而,据目前所知,有关Rashba自旋-轨 道耦合对量子点中双极化子性质的影响的工作尚 无报道. 本文基于 Lee-Low-Pines (LLP) 幺正变换, 采用 Pekar 型变分法研究了量子点中双极化子的性 质,侧重讨论了Rashba自旋-轨道耦合和LO声子 效应对双极化子基态能量和结合能的影响.

#### 2 理论模型与方法

考虑到二维量子点比三维量子点更易于控制 (量子点中的电子数)和观察(电子的空间分布),在 比较实验结果和理论预测方面二维量子点更重要. 考虑被约束在一个二维(*x-y*平面)抛物势量子点中 并与体纵光学(LO)声子相互作用的两电子体系, 体系的Frölich哈密顿量为<sup>[21]</sup>

$$H = H_{\rm e} + H_{\rm ph} + H_{\rm e-ph} + H_{\rm SO} + V_{\rm coul}, \qquad (1)$$

式中,第一项

$$H_{\rm e} = \sum_{j=1}^{2} \frac{p_j^2}{2m_{\rm b}} + V_{\rm couf}(\rho_1, \rho_2)$$
(2)

为两电子的能量,其中, $m_{\rm b}$ , $\rho_j$  (j = 1,2)和  $p_j(j = 1,2)$ 分别为两电子的带质量、坐标和动 量,  $V_{\text{couf}}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$  表示 x-y 平面内量子点的限定势,

$$V_{\rm couf}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) = \frac{1}{2} m_{\rm b} \omega_0^2 \sum_{j=1}^2 \rho_j^2, \qquad (3)$$

其中, ω0 为量子点的受限强度; 第二项

$$H_{\rm ph} = \sum_{k} \hbar \omega_{\rm LO} a_{k}^{+} a_{k} \tag{4}$$

是 声子 的 哈密 顿 量,  $a_{k}^{+}(a_{k})$  代表 波 矢 为  $k = (k_{||}, k_{z})$  的 LO 声子的产生 (湮灭) 算符; 第三项

$$H_{\text{e-ph}} = \sum_{j=1}^{2} \sum_{k} \left( v_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\rho}_{j}} + v_{k}^{*} a_{k}^{+} e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\rho}_{j}} \right)$$
(5)

是电子-LO声子相互作用项,式中V<sub>k</sub>为相互作用的傅里叶系数,

$$V_k = i \left(\frac{\hbar\omega_{\rm LO}}{k}\right) \left(\frac{\hbar}{2m_{\rm b}\omega_{\rm LO}}\right)^{1/4} \left(\frac{4\pi\alpha}{v}\right)^{1/2}, \quad (6)$$

这里, v 是晶体的体积,  $\alpha$  是无量纲的电子-声子耦 合强度,

$$\alpha = \frac{e^2}{2\varepsilon_{\infty}\hbar\omega_{\rm LO}} \left(\frac{2m_{\rm b}\omega_{\rm LO}}{\hbar}\right)^{1/2} (1-\eta), \qquad (7)$$

其中,  $\eta = \varepsilon_{\infty}/\varepsilon_0$  是介质的介电常数比,  $\varepsilon_{\infty}(\varepsilon_0)$  电 子所处介质的高频(静态)介电常数; 第四项

$$H_{\rm SO} = \sum_{j=1}^{2} \frac{\alpha_{\rm R}}{\hbar} (\boldsymbol{\sigma}_j \times \boldsymbol{p}_j)_z \tag{8}$$

是零磁场下Rashba自旋-轨道耦合对体系哈密顿 量的贡献,  $\sigma_j = (\sigma_{jx}, \sigma_{jy}, \sigma_{jz})$ 是Pauli算符,  $\alpha_R$ 为 Rashba自旋-轨道耦合常数, 满足 $\alpha_R = c\langle E \rangle$ , 其 中系数c与带宽和有效质量成反比<sup>[22,23]</sup>,  $\langle E \rangle$ 是自 建电场的期待值, 故 $\alpha_R$ 可以通过调节门电压来改 变, 在量子点异质结结构中Rashba效应占主导地 位<sup>[24]</sup>;最后一项

$$V_{\rm coul} = \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty} |\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2|} \tag{9}$$

表示两电子间库仑相互作用能.

为了求体系的基态能量,讨论变分函数  $U^{-1}HU 在 |\Psi\rangle$ 态中的期待值 $\overline{H}$ 的极值问题,按照 变分原理

$$\delta \bar{H} = \delta \langle \Psi | U^{-1} H U | \Psi \rangle = 0, \qquad (10)$$

这里

$$U = \exp\left[\sum_{k} \left(f_k a_k^+ - f_k^* a_k\right)\right]$$
(11)

是LLP 幺正变换<sup>[25]</sup>,其中  $f_k 和 f_k^*$ 为变分参数.假 设对于体系的基态高斯函数近似成立,则依据

Pekar 类型的变分法<sup>[26]</sup>, 选择体系的基态尝试波 函数为

$$|\Psi (\boldsymbol{\rho}_{1}, \boldsymbol{\rho}_{2}, S_{1z}, S_{2z})\rangle$$
  
=  $|\psi (\boldsymbol{\rho}_{1}, \boldsymbol{\rho}_{2})\rangle |\chi (S_{1z}, S_{2z})\rangle |0_{\text{ph}}\rangle, \quad (12)$ 

式中,

$$\psi(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) = \varphi(\boldsymbol{\rho}_1)\varphi(\boldsymbol{\rho}_2),$$
  
$$\varphi(\boldsymbol{\rho}_j) = \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\lambda^2 \boldsymbol{\rho}_j^2}{2}\right) \quad (j = 1, 2), \quad (13)$$

其中,  $\lambda$ 为变分参数,  $\varphi(\rho_j)$  (j = 1, 2)分别表示单电 子基态试探波函数,  $|0_{\text{ph}}\rangle$  (j = 1, 2) 是LO 声子的 真空态, 由 $a_k |0_{\text{ph}}\rangle = 0$  (j = 1, 2)确定. 体系的自 旋态 $\chi(S_{1z}, S_{2z})$ 则为

$$\chi(S_{1z}, S_{2z}) = [c_1 \alpha(1) + c'_1 \beta(1)] [c_2 \alpha(2) + c'_2 \beta(2)], \quad (14)$$

其中,

和

$$\boldsymbol{\alpha}(1) = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}(2) = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}_2 \end{bmatrix}$$
$$\boldsymbol{\beta}(1) = \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}(2) = \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}_2 \end{bmatrix}$$

分别代表电子自旋"向上"和"向下"的态,  $c_1(c_2)$  和  $c'_1(c'_2)$  为叠加系数.

将 (1)—(9) 式和 (11)—(14) 式代入 (10) 式中, 可确定变分参数  $f_k(f_k^*)$  和 $\lambda$ ,再经过冗长的计算, 得到双极化子的基态能量的上限为

$$E = \lim \langle \Psi | U^{-1} H U | \Psi \rangle$$
  
=  $E_{\rm SO} + E_{\rm e-ph} + E_{\rm couf} + E_{\rm coul},$  (15)

其中,  $E_{SO}$ ,  $E_{e-ph}$ ,  $E_{couf}$  和 $E_{coul}$ 分别表示 Rashba 自旋-轨道耦合能、电子-LO声子耦合能、量子点约 束势能量和两电子间库仑相互作用能.利用变分参 数  $f_k(f_k^*)$ 和 $\lambda$ 还可以推导得出量子点中双极化子 的结合能  $E_b$ 为

$$E_{\rm b} = 2E_0 - E,$$
 (16)

其中,  $E_0$ 为自由极化子的基态能量,  $E_b > 0$ 是形成 双极化子的条件<sup>[27]</sup>.

### 3 结果与讨论

为了直观地了解Rashba自旋-轨道耦合和电 声子耦合效应对双极化子基态性质的影响,图1— 图4给出了数值计算结果.图中,以 $\hbar\omega_{LO}$ 为能量单 位,以 $\omega_{LO}$ 为量子点受限强度 $\omega_0$ 单位.





Fig. 1. (a) The ground state energy E as a function of the confinement strength  $\omega_0$  at different dielectric constant ratio  $\eta$ ; (b) the ground state energy E as a function of the spin-obit coupling strength  $\alpha_{\rm R}$  at different electron-phonon coupling strength  $\alpha$ .

图1描写了双极化子基态能量E在(a)不同 介电常数比 $\eta$ (=0.1, 0.15, 0.2)下随量子点受限 强度 $\omega_0$ 的变化及(b)在不同电子-声子耦合强度  $\alpha$ (= 7.0, 8.0, 9.0)下随自旋-轨道耦合强度  $\alpha_{\rm R}$  的变化.由(15)式知,在考虑 Rashba 效应时,量子点中双极化子的基态能量由 Rashba 自旋-轨道耦合能

E<sub>SO</sub>、电子-LO声子耦合能 E<sub>e-ph</sub>、量子点约束势能 量 E<sub>couf</sub> 和两电子间库仑相互作用能 E<sub>coul</sub> 四部分 组成. 其中, E<sub>couf</sub>和 E<sub>coul</sub> 是正定的<sup>[21]</sup>, 这表明库 仑势和量子点的限定势是双极化子的排斥势,所以 在量子点中由于两个电子通过屏蔽的库仑势及量 子点的限定势相互排斥通常不能形成电子-电子结 构的束缚态; 然而, 由图1可以看出, E < 0, 这表 明量子点中基态双极化子处于稳定的束缚态,这是 因为双极化子的 $E_{e-ph}$ 总是负的<sup>[21]</sup>,而且,在有些 材料中,如离子晶体或极性半导体的量子结构中, 电子-声子耦合作用足够大(耦合强度 $\alpha > 6.0$ ), 致 使 $E_{e-ph}$ 在E中占主导,以至于能够克服上述排斥 而建立一个稳定的电子-电子结构,即形成稳定的 双极化子. 由图1(a) 可以看出, |E| 随 $\omega_0$  的增大而 减小,这与文献[21]的结论相一致,这是因为尽管  $E_{\text{couf}} 和 E_{\text{coul}} 与 E_{\text{e-ph}} 正负号相反, 但它们的绝对$ 值都随 $\omega_0$ 的增加而增大. 另外,  $\eta$ 对 |E| 随 $\omega_0$  的变 化有显著影响,表现在当 $\omega_0$ 一定时, |E|随 $\eta$ 的增大 而显著增加. 这是因为当η增大时,尽管两电子间 库仑排斥增加,但同时因两电子间空间电场强度增 大,势必引起两电子间介质的极化加强,从而进一 步推高占据主导地位的电子-声子耦合能的绝对值, 导致 |E| 随 n 的增大而显著增加. 由图 1 (a) 还可以 看出, Rashba 自旋-轨道耦合效应使得基态能量 E 分裂为 $E(\uparrow\uparrow), E(\downarrow\downarrow)$ 和 $E(\uparrow\downarrow)$ 三条能级,分别对应 两电子的自旋取向为"向上"、"向下"和"反平行" 三种情况,其中"向上"、"向下"两个能级分别位于 "反平行"能级的下、上方,这表明处于两电子的自 旋同为"向上"的双极化子态更加稳定. 由图1(b) 可以看出, |E| 随电子-声子耦合强度α的增大而 增加,这是因为在基态能量中电子-声子耦合能占 主导所致. 由图1(b)还可以看出,  $\alpha_{\rm B}$  对 |E|随  $\alpha$  的 变化产生显著影响, 表现在: 在给定 $\alpha$ 下, 两电子 的自旋取向均为"向上"和"向下"对应的基态能量  $E(\uparrow\uparrow)$ 和 $E(\downarrow\downarrow)$ 的起点在 $\alpha_{\rm R} = 0$ 处重叠;当两电子 的自旋取向不同时,  $E(\uparrow\uparrow)$  和  $E(\downarrow\downarrow)$  随  $\alpha_{\rm B}$  的变化表 现为直线减小和增加的两种截然相反的情形.



图 2 (a) 结合能  $E_b$  在不同介电常数比 $\eta$ 下随受限强度  $\omega_0$  的变化; (b) 结合能  $E_b$  在不同电声耦合强度  $\alpha$  下随自 旋-轨道耦合强度  $\alpha_R$  的变化

Fig. 2. (a) The binding energy  $E_{\rm b}$  as a function of the confinement strength  $\omega_0$  at different dielectric constant ratio  $\eta$ ; (b) the binding energy  $E_{\rm b}$  as a function of the spin-obit coupling strength  $\alpha_{\rm R}$  at different electron-phonon coupling strength  $\alpha$ .

图 2 描写了双极化子的结合能  $E_b$  (a)在不同介电常数比 $\eta$  (= 0.1, 0.15, 0.2)下随受限强度 $\omega_0$ 的变化及(b)在不同电子-声子耦合强度 $\alpha$ (= 7.0, 8.0, 9.0)下随自旋-轨道耦合强度 $\alpha_R$ 的变化. 由图 2 可以看出,结合能  $E_b$ 总是大于零,这表明在量子点中在电子-声子强耦合下两个电子通过声子场相互作用形成稳定的双极化子结构的条

件自然满足, 换句话说, 在电子-声子强耦合下不可 能抑制双极化子的形成. 由图 2 (a) 可以看出:  $E_b$ 随  $\omega_0$  的增大而增加, 这是因为随限定势( $\omega_0$ ) 的增 加, 电子-声子之间相互作用由于粒子运动范围的 减小而增强所致; 在相同  $\omega_0$  下,  $E_b$  随  $\eta$  的增大而 增加, 这是因为当介电常数比  $\eta$ 增大时, 尽管两电 子间库仑排斥力增加, 但同时因两电子间空间电场 强度增大,势必引起两电子间介质的极化加强,致 使声子效应显现并且在两电子间相互作用当中超 过库仑排斥力占主导地位,这个观点被称之为两电 子通过声子场相互吸引形成稳定双极化子结构的 物理机制; Rashba 自旋-轨道耦合效应对双极化子 结合能的影响与两电子自旋的空间取向有关,当 两电子自旋取向同时"向下"("向上")时, Rashba 自旋-轨道耦合效应使双极化子结合能增大(减小),  $\mu E_{\rm b}(\downarrow\downarrow) [E_{\rm b}(\uparrow\uparrow)] 曲线, 而两电子自旋取向为反平$ 行时 Rashba 自旋-轨道耦合效应对双极化子结合 能贡献为零, 即*E*(↑↓)曲线. 由图2(b)可以看出: 当两电子的自旋取向同时"向下"("向上")时,对 应的结合能  $E_{\rm b}(\downarrow\downarrow)$  [ $E_{\rm b}(\uparrow\uparrow)$ ] 随 Rashba 自旋-轨道 耦合强度 $\alpha_{\rm R}$ 的增大而直线增加(减小),这表明随 Rashba 自旋-轨道耦合常数 $\alpha_{\rm R}$ 的增加,双极化子 基态结合能表现为直线增加和减小两种截然相反 的情形;结合能 $E_{b}(\downarrow\downarrow)$ 和 $E_{b}(\uparrow\uparrow)$ 都随电声耦合强 度α的增大而增加,这是因为电子-声子耦合愈强, 声子被激发的几率就愈大,与此同时,有两个声子 激发的作用以及多声子间相互作用也愈大,致使两 电子通过声子场结合形成的双极化子越稳定.

图 3 表示 Rashba 自旋-轨道耦合能的绝对值 与基态能量的绝对值的比值  $|E_{SO}| / |E|$  (a) 在不同 电子-声耦合强度  $\alpha$ (= 7.0,9.0) 下随自旋-轨道耦合 强度  $\alpha_R$  的变化及 (b) 在不同介电常数比  $\eta$ (=0.1, 0.2) 下随受限强度  $\omega_0$  的变化. 双极化子的 Rashba

自旋-轨道耦合能由(↓↓)、(↑↑)两个能级组成,但 每一个能级并不是简单代表电子自旋"向上"或 "向下"态的Rashba自旋-轨道耦合能,而是由电 子自旋"向上"或"向下"态的 Rashba 自旋-轨道耦 合以及LO 声子效应共同作用的结果. 当材料选 定、有效质量和禁带宽度不可改变时,则系数c可 以视为常数,耦合常数 $\alpha_{\rm B}$ 的变化依靠于外加电场 或电压,因此改变有效电场可以使 $\alpha_{\rm R}$ 被控制.由 图 3 (a) 可以看出,  $|E_{SO}| / |E|$  随  $\alpha_{R}$  的增加而显著 增大, 当 $\alpha_{\rm R} = 0.2$ 时,  $5.9\% \leq |E_{\rm SO}|/|E| \leq 10.0\%$ ; 当 $\alpha_{\rm R} = 0.5$ 时, 13.1%  $\leq |E_{\rm SO}|/|E| \leq 32.0\%$ , 这些 数据表明,在双极化子的基态能量E当中Rashba 自旋-轨道耦合能 Eso 不能忽略. 另外, 两电子的 自旋取向和电子-声子耦合常数 $\alpha$ 对 $|E_{SO}|/|E|$ 随  $\alpha_{\rm R}$ 的变化产生较大影响,表现在: (↓↓)曲线的斜率 比(↑↑) 曲线的斜率大; 同时, 相同自旋取向的曲线  $[(\downarrow\downarrow)$ 曲线或(↑↑)曲线]的斜率随 $\alpha$ 的增加而减小, 这是由于 |E| 随  $\alpha$  的增加而增大所致. 由图 3 (b) 可以看出,  $|E_{SO}| / |E|$  随 $\omega_0$  的增加而增大, 这是由 于|E| 随ω0 的增大而减小所致. 另外, 介电常数 比 $\eta$ 和两电子的自旋取向对 $|E_{SO}|/|E|$ 随 $\omega_0$ 的变 化产生较大影响, 表现在:  $|E_{SO}|/|E|$  随 $\omega_0$  增加的 幅度随η的增加而减小,这是由于|E|随η的增大 而增大所致; 当η一定时, (↓↓) 曲线位于(↑↑) 曲线 的上方.



图 3 比值  $|E_{SO}|/|E|(a)$  在不同电声耦合强度  $\alpha$  下随自旋 - 轨道耦合强度  $\alpha_R$  的变化; (b) 比值  $|E_{SO}|/|E|$  在不同 介电常数比  $\eta$  下随受限强度  $\omega_0$  的变化

Fig. 3. (a) The ratio  $|E_{\rm SO}|/|E|$  as a function of the spin-obit coupling strength  $\alpha_{\rm R}$  at different coupling strength  $\alpha_{\rm i}$  (b) the ratio  $|E_{\rm SO}|/|E|$  as a function of the confinement strength  $\omega_0$  at different dielectric constant ratio  $\eta$ .

图 4 表示电子 - 声子耦合能的绝对值与双极 化子基态能量的绝对值的比值  $|E_{e-ph}| / |E|(a)$  在不 同电子 - 声子耦合强度  $\alpha$  (= 7.0,9.0) 下随自旋 - 轨 道耦合强度  $\alpha_R$  的变化及 (b) 在不同介电常数比  $\eta(=0.1,0.2)$  下随受限强度  $\omega_0$  的变化. 由图 4 可以 看出, 2.53  $\leq |E_{e-ph}| / |E| \leq 5.61$ , 这些数据表明, 电 子 - 声子耦合能  $E_{e-ph}$  在双极化子的基态能量 E 当 中占主导. 由图 4 (a) 可以看出, 比值  $|E_{e-ph}| / |E|$  随  $\alpha_R$  的增加而增大, 这表明 Rashba 自旋 - 轨道耦合 将进一步强化电子 - 声子耦合. 另外, 由图 4 (a) 还 可以看出, 电子 - 声子耦合强度  $\alpha$  和两电子的自旋 取向对  $|E_{e-ph}| / |E|$  随  $\alpha_R$  的变化影响较大, 表现在: 相同 $\alpha$ 的 (↓↓), (↑↑) 两条曲线的起点在 $\alpha_{\rm R} = 0$ 处重 叠, 但 (↓↓) 曲线随 $\alpha_{\rm R}$ 的增加而增大的幅度比 (↑↑) 曲线更大; 相同自旋取向的曲线 [(↓↓) 曲线或 (↑↑) 曲线] 的斜率随 $\alpha$ 的增加而减小, 这是由于 | $E_{\rm e-ph}$ | 随 $\alpha$ 的增加而增大的幅度比 |E| 慢所致. 由图 4 (b) 还可以看出, 比值 | $E_{\rm e-ph}$ | /|E| 随 $\omega_0$  的增加而增大, 这是因为 | $E_{\rm e-ph}$ | 随 $\omega_0$ 的增加而增大, 而 |E| 随 $\omega_0$ 的增加而减小. 另外, 介电常数比 $\eta$ 和两电子的自 旋取向对 | $E_{\rm e-ph}$ | /|E| 随 $\omega_0$  的变化影响较大, 表现 在: 比值 | $E_{\rm e-ph}$ | /|E| 随 $\eta$  的减小而增大, 这是因为 | $E_{\rm e-ph}$ | (↓) 曲线位于 (↑↑) 曲线之上.



图4 (a) 比值  $|E_{e-ph}|/|E|$  在不同电声耦合强度  $\alpha$  下随自旋 -轨道耦合强度  $\alpha_R$  的变化; (b) 比值  $|E_{e-ph}|/|E|$  在不同介电常数比  $\eta$  下随受限强度  $\omega_0$  的变化

Fig. 4. (a) The ratio  $|E_{e-ph}|/|E|$  as a function of the spin-obit coupling strength  $\alpha_{\rm R}$  at different coupling strength  $\alpha$ ; (b) the ratio  $|E_{e-ph}|/|E|$  as a function of the confinement strength  $\omega_0$  at different dielectric constant ratio  $\eta$ .

比较图 **3**和图 **4**不难看出,尽管  $|E_{e-ph}|/|E| > |E_{SO}|/|E|$ ,即在双极化子基态能量中,电子-声子 耦合能的权重明显大于 Rashba 自旋-轨道耦合能 的权重,但电子-声子耦合与 Rashba 自旋-轨道耦 合相互渗透、彼此影响显著.

#### 4 结 论

首次研究了 Rashba 自旋-轨道耦合对量子点 中双极化子基态性质的影响,数值结果表明:1)在 电子-声子强耦合(耦合常数 $\alpha > 6$ )下量子点中形 成稳定双极化子结构的条件(结合能 $E_b > 0$ )自然 满足;2)双极化子的结合能 $E_b$ 随量子点受限强度  $\omega_0$ 、介电常数比 $\eta$ 和电子-声子耦合强度 $\alpha$ 的增大而 增加、随 Rashba 自旋-轨道耦合常数 $\alpha_R$ 的增加而 表现为直线增加和减小两种截然相反的情形; 3) 量 子点中双极化子处于束缚态, Rashba自旋-轨道耦 合效应使双极化子基态能量分裂为 $E(\uparrow\uparrow)$ ,  $E(\downarrow\downarrow)$ 和 $E(\uparrow\downarrow)$  三条能级, 分别对应两电子的自旋取向为 "向上"、"向下"和"反平行"三种情况, 基态能量的 绝对值 |E|随 $\eta$ 和 $\alpha$ 的增大而增加, 随 $\alpha_{\rm R}$  的增加而 表现为直线增加和减小两种截然相反的情形; 4) 在 双极化子的基态能量E中, 电子-声子耦合能的权 重明显大于 Rashba自旋-轨道耦合能的权重, 同时, 电子-声子耦合与 Rashba自旋-轨道耦合相互渗透、 彼此影响显著.

#### 参考文献

[1] Rashba E I, Tela F T 1960 Sov. Phys. Solid State 2 1109

- [2] Bychkov Y A, Rashba E I 1984 J. Phys. C 17 6039
- [3] Das B, Datta S, Reifenberger R 1990 Phys. Rev. B 41 8278
- [4] Datta S, Das B 1990 Appl. Phys. Lett. 56 665
- [5] Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H, Enoki T 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1335
- [6] Engels G, Lange J, Schapers T, Lüth H 1997 *Phys. Rev.* B 55 R1958
- [7] Hu C M, Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H, Osaka J, Pfeffer P, Zawadzki W 1999 *Phys. Rev. B* 60 7736
- [8] Winkler R 2000 Phys. Rev. B 62 4245
- [9] Rossler U, Malcher F, Lommer G 1989 High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II (Berlin: Springer-Verlag) p376
- [10] Zhang X C, Pfeufer-Jeschke A, Ortner K, Hock V, Buhmann H, Becker C R, Landwehr G 2001 Phys. Rev. B 63 245305
- [11] Qiu Z J, Gui Y S, Shu X Z, Dai N, Guo S L, Chu J H
  2004 Acta Phys. Sin. 53 1186 (in Chinese) [仇志军, 桂永 胜, 疏小舟, 戴宁, 郭少令, 褚君浩 2004 物理学报 53 1186]
- [12] Tsitsishvili E, Lozano G S, Gogolin A O 2004 *Phys. Rev.* B 70 115316
- [13] Manvir S, Kushwaha 2008 J. Appl. Phys. 104 083714
- [14] Li J L, Li Y X 2010 Chin. Phys. Lett. 27 057202

- [15] Hassanabadi H, Rahimov H, Zarrinkamar S 2012 Fewbody Syst. 52 87
- [16] Yin J W, Li W P, Yu Y F, Xiao J L 2011 J. Low Temp. Phys. 163 53
- [17] Shan S P, Chen S H, Xiao J L 2014 J. Low Temp. Phys. 176 93
- [18] Fai L C, Teboul V, Monteil A, Maabou A, Nsangou I 2005 Condens. Matter Phys. 8 639
- [19] Pan J S 1985 Phys. Status Solid B 127 307
- [20] Zhao Y W, Han C, Xin W, Eerdunchaolu 2014 Superlattices Microstruct. 74 198
- [21] Eerdunchaolu, Bai X F, Han C 2014 Acta Phys. Sin. 63
  027501 (in Chinese) [额尔敦朝鲁, 白旭芳, 韩超 2014 物理 学报 63 027501]
- [22] Lommer G, Malcher F, Rossler U 1988 Phys. Rev. Lett.
  60 728
- [23] Sun Q F, Wang J, Guo H 2005 Phys. Rev. B 71 165310
- [24] Voskoboynikov O, Lee C P, Tretyak O 2001 Phys. Rev. B 63 165306
- [25] Lee T D, Low F M, Pines D 1953 Phys. Rev. 90 297
- [26] Yildirim T, Ercelebi A 1999 J. Phys. Conden. Matt. 3 1271
- [27] Adamowski J 1989 Phys. Rev. B 39 3649

## Properties of the ground state of two-dimensional bipolaron with Rashba spin-orbit coupling<sup>\*</sup>

Wuyunqimuge<sup>1)</sup> Xin Wei<sup>2)</sup> Eerdunchaolu<sup>2)†</sup>

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

2) (Department of Physics, Hebei Normal University of Science and Technology, Qinhuangdao 066004, China)

(Received 4 April 2016; revised manuscript received 24 May 2016)

#### Abstract

In this paper, based on the Lee-Low-Pines transformation, the ground-state properties of the bipolaron with the Rashba spin-orbit coupling effect in the quantum dot are studied by using the Pekar variational method. The expressions for the ground-state interaction energy  $E_{int}$  and binding energy  $E_b$  of the bipolaron are derived. The results show that  $E_{int}$  is composed of four parts: the electron-longitudinal optical (LO) phonon coupling energy  $E_{e-ph}$ , confinement potential of the quantum dot  $E_{couf}$ , Coulomb energy between two electrons  $E_{coul}$  and additional term in the Rashba spin splitting energy  $E_{R-ph}$  originating from the LO phonon, where  $E_{couf}$  and  $E_{coul}$  are positive definite. These indicate that  $E_{couf}$  and  $E_{coul}$  are the repulsive potential of the bipolaron. Generally, it is unable to form the electron-electron coupling structure in the quantum dot because two electrons repel each other by means of the screened Coulomb potential and confinement

<sup>\*</sup> Project supported by the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. E2013407119), and the Items of Institution of Higher Education Scientific Research of Hebei Province, China (Grant Nos. ZD20131008, Z2015149, Z2015219).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: eerdunchaolu@163.com

potential of the quantum dot. However, the numerical results show that the ground-state binding energy of the bipolaron  $E_{\rm b}$  is greater than zero under the condition of the electron-phonon strong coupling (coupling strength  $\alpha > 6$ ), so the condition of forming the steady bipolaron structure in quantum dots is naturally met (binding energy  $E_{\rm b} > 0$ ). In addition, the ground-state energy of the bipolaron E is always less than zero, thus the ground-state biplaron in the quantum dot is in the steady bound state. This can be explained by the physical mechanism. Firstly, the electron-LO phonon coupling energy  $E_{e-ph}$  in the ground-state interaction energy of the bipolaron is always negative. Secondly, the electron-LO phonon coupling interaction in the low-dimensional structures of II-VI semiconductors is great enough (generally  $\alpha > 6.0$ ) so that the electron-LO phonon coupling energy  $E_{e-ph}$  is dominant in the ground-state energy E and, therefore the screened Coulomb potential and confinement potential of the quantum dot can be overcome and a steady electron-electron structure can be formed. The numerical results also indicate that the binding energy of the bipolaron  $E_{\rm b}$ increases with increasing the confinement strength of quantum dot  $\omega_0$ , dielectric constant ratio of medium  $\eta$  and electronphonon coupling strength  $\alpha$ , but it shows the direct opposite cases from linear increase to decrease with increasing the Rashba spin-obit coupling strength  $\alpha_{\rm R}$ ; the ground-state energy of the bipolaron splits into three energy levels due to the Rashba effect:  $E(\uparrow\uparrow)$ ,  $E(\downarrow\downarrow)$  and  $E(\uparrow\downarrow)$ , which correspond to spin orientations of two electrons respectively: "up", "down" and "antiparallel"; the absolute value of ground-state energy |E| increases with increasing  $\eta$  and  $\alpha$ , but it shows the direct opposite cases from linear increase to decrease with increasing the Rashba spin-obit coupling strength  $\alpha_{\rm R}$ ; the electron-phonon coupling energy obviously accounts for a larger proportion than that of the Rashba spin-obit coupling energy in the ground-state energy of the bipolaron, but the electron-phonon coupling and Rashba spin-obit coupling infiltrate each other and influence each other significantly. In short, the electron in narrow-gap II-VI heterojunctions have higher Rashba spin splitting energy and larger application range. For these quantum dot structures, it is impossible and unnecessary to inhibit the formation of bipolarons. It is more accurate that the bipolaron is chosen as the elementary excitation than the single polaron when investigating the electron-phonon interaction and Rashba spin-orbit coupling, and the bipolaron has more practical significances and potential application values.

Keywords: narrow-gap II-VI heterojunction, bipolaron, Rashba spin-obit coupling, ground-state energy PACS: 78.67.Hc, 71.38.-k, 71.38.Mx DOI: 10.7498/aps.65.177801