

文章编号: 1673-5196(2006)06-0158-03

施主离子对抛物阱中束缚极化子的影响

元丽华¹, 安张辉², 王旭³, 张材荣¹, 马军¹

(1. 兰州理工大学 理学院, 甘肃 兰州 730050; 2. 中国地震局兰州地震研究所, 甘肃 兰州 730000; 3. 内蒙古大学 理学院, 内蒙古 呼和浩特 010021)

摘要: 从电子-声子相互作用的哈密顿量出发, 采用改进的 LLP 方法研究了无限深抛物阱中束缚极化子的极化势和结合能随施主离子位置 z_0 的变化关系. 结果表明, 电子与施主离子间的距离不同, 则极化势随施主离子位置的变化关系也不同. 对于给定的阱宽, 随着施主离子远离阱中心, 束缚极化子的结合能迅速减小; 阱宽不同, 束缚极化子的结合能减小的程度不同.

关键词: 抛物阱; 极化子; 电子-声子相互作用; 结合能

中图分类号: O471.1 **文献标识码:** A

Effects of donor ion on bound polaron in a parabolic quantum well

YUAN Li-hua¹, AN Zhang-hui², WANG Xu³, ZHANG Cai-rong¹, MA Jun¹

(1. School of Science, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China; 2. Lanzhou Institute of Seismology, CEA, Lanzhou 730000, China; 3. School of Science, Inner Mongolia University, Hohhot 010021, China)

Abstract: By using the method of modified Lee-Low-Pines (LLP), the variation of polarization potential and binding energy of the bound polaron with the ion position z_0 of the donor in the parabolic quantum well (PQW) was investigated in view of Hamilton quantity about the interaction of the electron with bulk longitudinal optical (LO) phonon. It was found that, if the interval between the electron and the donor ion was different, the variation of polarization potential with the donor ion position z_0 in the PQW would be different also. The binding energy of bound polaron decreased rapidly with the distance of the donor ion from the center of the well for given well width. For different well widths, however, there would be various decreasing rates of the binding energy of bound polaron.

Key words: parabolic quantum well; polaron; electron phonon interaction; binding energy

通过分子束外延或金属有机化合物化学气相沉淀方法, 量子阱可以被制成各种几何形状, 例如方势阱, 三角阱, 阶梯阱, 抛物阱 PQW (Parabolic quantum well) 等^[1]. PQW^[2~5] 的研制始于 20 世纪 80 年代初期, 与方势阱相比, PQW 有更强的束缚性, 电子和空穴具有几乎均匀的态密度^[2], 光非线性比方势阱更加敏感^[3]. PQW 的研究对新型器件的研发有重要的价值, 如 PQW 的光致发光和电子束的电子反射测量已被用来研究价带和导带间的能隙不连续的配分; 利用 PQW 的低漏流和弱电场灵敏度来设计红外探测器^[6]. 一些理论工作^[7~9] 还对抛物量

子阱中的电子-声子相互作用作了研究. 如 Ren 等人^[7] 用费曼路径积分法计算了抛物阱中极化子基态能量, 给出极化子结合能随阱有效深度的变化关系. 结果表明, 结合能随阱有效深度的增大而缓慢地增加, 电子-声子相互作用耦合常数越大, 结合能就越大.

本文采用体声子 (LO) 近似, 利用改进的 LLP 方法, 计算了无限抛物阱中束缚极化子的结合能和极化势随施主离子位置变化的关系.

1 理论模型

考虑一个电子处于阱宽为 $L = 2d$ 的 PQW 中, 该电子受到处于点 $(0, 0, z_0)$ 的一正施主离子束缚, 并且它们与 LO 声子相互作用. 本文仅讨论系统的基态, 可近似认为电子波函数完全局限在阱内, 于是

收稿日期: 2005-05-09

基金项目: 国家自然科学基金(10164003)

作者简介: 元丽华(1977-), 女, 山西朔州人, 硕士, 讲师.

可以采用无限抛物量子阱近似,系统(束缚极化子)哈密顿量^[10~13]为

$$H = H_e + H_{L0} + H_{eL0} \quad (1)$$

其中 H_e 包括电子的动能,抛物势及库仑势,即

$$H_e = \frac{p_e^2}{2m_e} + V_0 \left(\frac{z}{d} \right)^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} \quad (2)$$

式中 p_e 是电子的动量, m_e 是电子的有效带质量, V_0 是抛物阱深度, d 为半阱宽, $r = \sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}$ 是电子与施主离子间的距离, ϵ_∞ 是阱材料的高频介电常数.

H_{L0} 为 LO 声子项, H_{eL0} 为电子、施主离子与 LO 声子相互作用项,分别表示为

$$H_{L0} = \sum_{kmp} \hbar \omega_{L1} a_{kmp}^\dagger a_{kmp} \quad (3)$$

$$H_{eL0} = \sum_{kmp} \{ [V_{kmp}(z) e^{ik \cdot \rho} - V_{kmp}(z_0)] a_{kmp} + h \cdot c \cdot \} \quad (4)$$

式中 $V_{kmp}(z) = \frac{iB}{(k^2 + k_m^2)^{1/2} \text{csn}(k_m z)}$

$$B = \sqrt{2} \left[\frac{4\pi\alpha_1}{\Omega} \right]^{1/2} \left[\frac{\hbar}{2m_0 \omega_{L1}} \right]^{1/4} \hbar \omega_{L1}$$

$$k_m = \frac{m\pi}{2d}$$

$$\Omega = S 2d$$

$$\text{csn}(k_m z) = \begin{cases} \cos(k_m z) & m = 1, 3, 5, \dots \\ \sin(k_m z) & m = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

LO 声子的频率是 ω_{L1} , a_{kmp}^\dagger (a_{kmp}) 是 LO 声子的产生(湮灭)算符,波矢 (k, k_m) , 宇称 p 是指相对于平面的镜像对称,偶宇称时, m 取奇数,奇宇称时, m 取偶数. α_1 是 Fröhlich 电子-声子耦合常数,且 $\alpha_1 = (\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}) (m_0 e^4 / 2\hbar \omega_{L1})^{1/2}$.

首先通过第一次幺正变换^[13,14]消去 H_{eL0} 中施主离子与纵光学声子相互作用项,可得

$$U_1 = \exp \left\{ \sum_{kmp} \left[\frac{1}{\hbar \omega_{L1}} V_{kmp}(z_0) a_{kmp} + h \cdot c \cdot \right] \right\} \quad (5)$$

这个变换可消去施主离子与纵光学声子相互作用对电子总能量的贡献.通过这次变换后可求出极化势(polarization potential)^[13~15].这一势能项是 1994 年 Marini 等人^[15]在研究量子点中激子-声子相互作用时首次以电子-空穴交换作用(electron hole exchange interaction)提出的.其数学表达式为

$$H_x = \langle 0 | U_1^{-1} H_{eL0} U_1 | 0 \rangle = \sum_{kmp} \left[\frac{1}{\hbar \omega_{L1}} V_{kmp}(z) V_{kmp}^*(z_0) e^{ik \cdot \rho} + h \cdot c \cdot \right] \quad (6)$$

通过第一次幺正变换后哈密顿量变为

$$H_{\text{eff}} = H_e + H_x + H_{L0} +$$

$$\sum_{kmp} [V_{kmp}(z) e^{ik \cdot \rho} a_{kmp} + h \cdot c \cdot] \quad (7)$$

2 极化子的能量

第二次幺正变换^[13,16]的形式为

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_{kmp} [f_1 a_{kmp} + h \cdot c \cdot] \right\} \quad (8)$$

式中 f_1 为变分参数.

体系总的波函数为

$$|\Psi\rangle = U_2 |\psi(\mathbf{r})\rangle |0\rangle \quad (9)$$

极化子基态能量的变分表达式为

$$E_{\text{tot}} = \langle \Psi | H_{\text{eff}} | \Psi \rangle \quad (10)$$

对 f_1 求变分最小可以得到

$$f_1 = - \frac{\langle \psi | V_{kmp}(z) e^{ik \cdot \rho} | \psi \rangle}{\hbar \omega_{L1}} \quad (11)$$

所选的试探波函数为

$$\psi(\mathbf{r}) = N e^{-\alpha \rho} e^{-\beta z^2} \quad (12)$$

式中 α, β 为变分参数; N 为归一化常数.束缚极化子基态能量的变分表达式可写为

$$E_{\text{tot}} = \langle \psi | (H_e + H_x) | \psi \rangle + E_{L0} \quad (13)$$

$E_{L0} = - \sum_{kmp} \hbar \omega_{L1} |f_1|^2$ 是电子-LO 声子相互作用对极化子基态能量的贡献.

束缚极化子的结合能为

$$E_b = E_f - E_{\text{tot}} \quad (14)$$

式中 E_f 是自由极化子的基态能量.

3 数值计算和讨论

数值计算中,抛物阱中阱材料的参数近似取为 GaAs 材料中的相应参数,垒材料的参数取为 AlAs 材料中的相应参数^[10].能量的单位为 meV,长度的单位为 nm.

图 1 是阱宽为 40 nm 时 PQW 中束缚极化子的极化势随着施主离子的位置 z_0 的变化关系.从图中

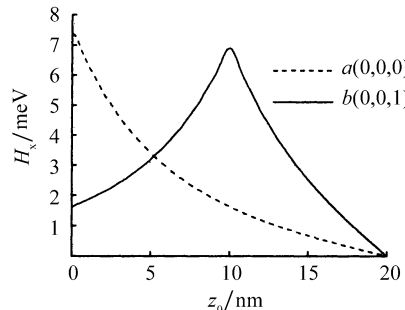


图 1 给定阱宽($L=40 \text{ nm}$)的 PQW 中束缚极化子的极化势随施主离子的位置 z_0 的变化关系

Fig. 1 Variation of polarization potential of bound polaron with the position z_0 of donor ion in PQW for given well width ($L=40 \text{ nm}$)

可看出,如果电子位于阱中心时,极化势随着施主离子远离阱中心而迅速减小,当施主离子位于阱界面时,极化势为 0;如果电子位于某一位置($\rho=0, z=1$)时,极化势随着施主离子远离阱中心先增大,当施主离子与电子间距离最小时极化势最大,然后又迅速减小,在界面处为 0.这说明极化势与电子和施主离子间的距离有密切的关系.由于电子被施主离子所束缚着,电子与施主离子的距离越小,在消去 $H_{e-1,0}$ 中施主离子与纵光学声子相互作用项时,所产生的极化势越大.

在给定阱宽 L (20 nm, 40 nm) 的 PQW 中束缚极化子的结合能随施主离子的位置 z_0 的变化关系见图 2.从图中可以看出,阱宽为 20nm 的 PQW 中束缚极化子的结合能大于阱宽为 40 nm 的 PQW 中束缚极化子的结合能,这与以前的结论^[9]一致.对于较宽的量子阱,阱宽越小,束缚极化子的波函数被压缩到越小的区域内,于是结合能上升.另外,在两种量子阱中,结合能 E_b 都随着 z_0 增大而降低,但降低的程度有所不同. L 为 20 nm 的量子阱中, E_b 随 z_0 的增大而迅速降低,而 L 为 40 nm 的量子阱中 E_b 随 z_0 的增大降低的程度较缓慢.

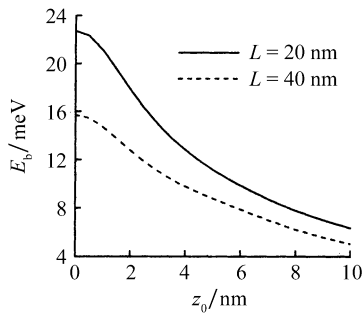


图 2 PQW 中束缚极化子的结合能随施主离子的位置 z_0 的变化关系

Fig.2 Variation of binding energy of bound polaron with the position z_0 of the donor ion in PQW

4 结论

从电子-声子相互作用的哈密顿量出发,利用体 LO 声子近似,理论计算中采用改进的 LLP 方法^[13]处理电子-声子相互作用和施主离子-声子相互作用.主要研究了抛物量子阱中束缚极化子的结合能和极化势随施主离子位置 z_0 的变化关系.研究表明,当阱宽一定时,极化势与电子和施主离子间的距离有密切关系,且在阱的界面极化势为 0.对于给定的阱宽,随施主离子远离阱中心,PQW 中束缚极

化子的结合能逐渐降低,并且阱宽不同降低的程度也不同.阱宽较小的 PQW 中束缚极化子的结合能大于阱宽较大的 PQW 中束缚极化子的结合能.

参考文献:

[1] YUHP F, WANG K L. Formalism of the Kronig-Penney model for superlattices of variable basis [J]. Phys Rev B, 1988, 38 (18):13 307-13 315.

[2] MILLER R C, GOSSARD A C, KLEINMAN D A, et al. Parabolic quantum well with the GaAs-AlxGa1-xAs system [J]. Phys Rev B, 1984, 29(6):3 740-3 743.

[3] GOSSARD A J C, MILLER R C, WIEGMANN W. MBE growth and energy levels of quantum wells with special shapes [J]. Surf Sci, 1986, 174(1):131-135.

[4] PLOOG K, DÖHLER G H. Compositional and doping superlattices in III-V semiconductors [J]. Adv Phys, 1983, 32: 285-359.

[5] SHAYEGAN N, SAJOTO T, SANTOS M, et al. Realization of a quasi three dimensional modulation doped semiconductor structure [J]. Appl Phys Lett, 1988, 53:791-793.

[6] YUAN Wu pen. Exact analytic analysis of finite parabolic quantum wells with and without a static electric field [J]. Phys Rev B, 1993, 48(23):17 316-17 321.

[7] REN Y H, CHEN Q H, YU Y B, et al. Ground state description for polarons in parabolic quantum wells [J]. J Phys: Condens matter, 1998, 10:6 565-6 572.

[8] SENGER R T, ERCELEBI A. Path integral approximation on the stability of large bipolarons in quasi one dimensional confinement [J]. Phys Rev B, 2000, 61(9):6 063-6 068.

[9] ZHAO Fengqi, LIANG X X, BAN S L. Energy levels of a polaron in a parabolic quantum well [J]. International Journal of Modern Physics B, 2001, 15(5):527-535.

[10] ZHENG R S, BAN S L, LIANG X X. Effects of interface bulk optical phonons on polarons in a quantum well [J]. Phys Rev B, 1994, 49(3):1 796-1 801.

[11] LIANG X X, WANG X. Electron-Phonon interaction in a quantum well [J]. Phys Rev B, 1991, 43(6):5 155-5 158.

[12] LIANG X X, DAVISON S G. Electron optical phonon interaction in a trilayer system of polar crystals [J]. Surface Science, 1993, 298:225-240.

[13] MELNIKOVA D V, BEALL FOWER W. Bound polaron in a spherical quantum dot: Strong electron phonon coupling case [J]. Phys Rev B, 2001, 63(16):1-8.

[14] PLATZMAN P M. Ground state energy of bound polarons [J]. Phys Rev, 1962, 125(6): 1 961-1 965.

[15] MARINI J C, STEBE B, KARTHEUSER E. Exciton phonon in CdSe and CuCl polar semiconductor nanospheres [J]. Phys Rev B, 1994, 50(19):14 302-14 308.

[16] 李正中. 固体理论 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1985.