

文章编号: 1000-7032(2007)04-0485-04

光学极化子性质对耦合强度和磁场的依赖性

赵翠兰¹, 王国胜², 朝华¹, 肖景林¹

(1. 内蒙古民族大学 物理与电子信息学院, 内蒙古 通辽 028043 2 河北科技师范学院 数理系, 河北 秦皇岛 066004)

摘要: 应用线性组合算符和么正变换方法, 研究磁场和耦合强度对光学极化子性质的影响。数值计算表明: 当电子接近晶体表面时, 光学极化子的振动频率、基态能量和第一激发能仅与磁场有关, 且随磁场强度的增强而增大; 当电子远离晶体表面时, 基态能量和第一激发能与磁场强度和耦合参数均有关, 且随磁场强度和耦合参数的增加而增加。

关键词: 光学极化子; 磁场强度; 耦合参数

中图分类号: O482.3

PACC: 6320K; 7138

文献标识码: A

1 引 言

自 Ibach^[1]在 ZnO 等半导体表面上做了低能电子衍射 (LEED) 实验以来, 众多的学者对半导体表面或界面极化子的性质进行了广泛研究。Huybrechts^[2]用线性组合算符方法, 讨论了极化子内部激发态随耦合强度的变化规律。Kandemir 等^[3]用束缚 Landau 态方法研究了二维磁极化子的性质。Mukhopadhyaya 等^[4]利用 LLP 么正变换方法, 讨论电子-LO 声子间耦合常数取任意值以及在任意受限强度下, 抛物量子点中电子第一激发态的极化修正。朱等^[5]应用 Landau-peak 变分法, 研究抛物量子点内强耦合极化子的性质, 表明极化子束缚能、平均声子数与外场有关。周和顾等^[6]用 Landau-peak 变分法, 讨论了盘形量子点中强耦合极化子的性质, 得出极化子基态、激发态的束缚能、共振频率与受限强度、外磁场强度有关。Chen 等^[7]通过将包含电子自旋-轨道相互作用的哈密顿量精确对角化, 研究了 GaAs 量子点中电子-声学声子散射的自旋弛豫时间, 表明: 自旋弛豫时间与磁场、量子点尺度和温度有关。我们曾使用线性组合算符与么正变换相结合的方法研究极化子、磁极化子的基态、激发态性质^[8-11], 得到了理想的结果, 本文将采用这种方法研究磁场和耦合强度对光学极化子性质的影响。

2 理论计算

设晶体表面位于 xoy 平面, 表面法线方向在 z 轴上, 在 z 的半无限空间里充满着极性晶体, 且置于外磁场 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ 中, 计及电子-LO 声子相互作用的体系的哈密顿量为

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{\beta^2}{4} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y + \frac{\beta^2}{4} x \right)^2 + \frac{e^2 (\epsilon_0 - 1)}{4\epsilon \epsilon_\infty (\epsilon_\infty + 1)} + \sum_k \epsilon \omega_L a_k^+ a_k + \sum_k \frac{1}{k} \sin(k_z z) \cdot \left[V_k^* a_k^+ \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}) + \mathbf{h} \cdot \mathbf{c} \right] \quad (1)$$

其中

$$V_k = \left[\frac{4\pi e^2 \epsilon \omega_L}{\epsilon V} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$\beta^2 = \frac{2B}{c}, \quad \frac{1}{\epsilon} = \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} + \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 1} \quad (3)$$

其中 m 是电子的带质量, e 是电子电荷, \mathbf{p} 和 $\boldsymbol{\rho}$ 分别是电子的动量和 xoy 平面的坐标, a_k^+ (a_k) 是波矢为 \mathbf{k} 的体纵光学 (LO) 声子的产生 (湮灭) 算符, ω_L 是 LO 声子的频率, ϵ_0 (ϵ_∞) 是静态 (高频) 介电常数, V 是晶体的体积, c 是光速。

首先将哈密顿量分成平行于晶体表面的分量 H_{\parallel} 和垂直于晶体表面的分量 H_{\perp}

$$H = H_{\parallel} + H_{\perp} \quad (4)$$

其中

收稿日期: 2006-08-25 修订日期: 2006-11-24

基金项目: 国家自然科学基金 (10347004); 内蒙古自治区高等学校科学研究基金 (N105074) 资助项目

作者简介: 赵翠兰 (1962-), 女, 内蒙古赤峰人, 硕士, 教授, 主要从事凝聚态理论的研究。

E-mail: nmdz@163.com, Tel: (0475) 8313384

$$H_{\perp} = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon_{\infty} - 1)}{4\epsilon\epsilon_{\infty}(\epsilon_{\infty} + 1)} \quad (5)$$

其余为 H_{\parallel} 。在绝热近似下, 处理 xoy 平面的运动时, 将 z 看成参量。对 H_{\parallel} 进行两次么正变换

$$U_1 = \exp\left[-ia \sum_k k_{\parallel} \cdot \rho a_k^+ a_k\right] \quad (6)$$

$$U_2 = \exp\left[\sum_k (a_k^+ f_k - a_k f_k^*)\right] \quad (7)$$

其中 a 为表示耦合强度的参量, $f_k (f_k^*)$ 是变分参量函数, 并对电子运动的动量和坐标引进下列线性组合算符

$$p_j = \left(\frac{mE\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (b_j + b_j^+) \\ \rho = \left\{\frac{E}{2m\lambda}\right\}^{\frac{1}{2}} (b_j - b_j^+), \quad j = x, y \quad (8)$$

其中 λ 是变分参量。得到

$$H' = U_2^{-1} U_1^{-1} H_{\parallel} U_1 U^2 \quad (9)$$

选取尝试波函数为

$|\phi\rangle = |\phi(z)\rangle |\phi(\rho)\rangle |n\rangle$, $|\phi(\rho)\rangle$ 和 $|\phi(z)\rangle$ 分别是描写电子在 xoy 平面内和 z 方向运动的波函数, $|n\rangle$ 是声子态。对基态计算得

$$\langle\phi_0|H'| \phi_0\rangle =$$

$$\langle\phi(z)| \langle\phi(\rho)| \langle 0|H'| 0\rangle |\phi(\rho)\rangle |\phi(z)\rangle = \\ \langle\phi(z)| F(\lambda, f_k) |\phi(z)\rangle$$

将变分参量函数 $F(\lambda, f_k)$ 对 f_k 取变分, 并将求和化为积分, 得

$$F(\lambda) = \frac{E\lambda(1-a)^2}{2} + \frac{E\omega_c^2}{8\lambda} - \\ \alpha_L E\omega_L \left[\eta_1(a, \lambda) - \eta_2(z, a, \lambda) \right] \quad (10)$$

将式(10)对 λ 取变分得 λ 值, 计算后得电子的基态能量为

$$E_0 = E_{0\parallel} + E_{\perp}$$

其中

$$E_{0\parallel} = \frac{E\lambda(1-a)^2}{2} + \frac{E\omega_c^2}{8\lambda} - \\ \alpha_L E\omega_L \left[\eta_1(a, \lambda) - \eta_2(z, a, \lambda) \right] \quad (11)$$

$$E_{\perp} = \langle\phi(z)| \left[\frac{p_z^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon_{\infty} - 1)}{4\epsilon\epsilon_{\infty}(\epsilon_{\infty} + 1)} \right] |\phi(z)\rangle \quad (12)$$

选第一激发态波函数 $|\phi\rangle = |\phi(z)\rangle |\phi(\rho)\rangle |1\rangle$, 计算得第一激发态能量为

$$E_1 = E_0 + \frac{E\lambda}{2} + \frac{E\omega_c^2}{8\lambda} -$$

$$\alpha_L E\omega_L \frac{1}{\lambda} (1-a)^2 \left[\eta_3(a, \lambda) - \eta_4(z, a, \lambda) \right] \quad (13)$$

则第一激发能为

$$\Delta E_1 = \frac{E\lambda}{2} + \frac{E\omega_c^2}{8\lambda} -$$

$$\alpha_L E\omega_L \frac{1}{\lambda} (1-a)^2 \left[\eta_3(a, \lambda) - \eta_4(z, a, \lambda) \right] \quad (14)$$

以上诸式中的各 $\eta_i(z, a, \lambda)$ 函数分别为

$$\eta_1(a, \lambda) = \int_0^{\infty} dx \frac{e^{-(1-a)2x^2\omega_L/\lambda}}{1+a^2x^2},$$

$$\eta_2(z, a, \lambda) = \int_0^{\infty} dx \frac{e^{-2a_1x - (1-a)2x^2\omega_L/\lambda}}{1+a^2x^2},$$

$$\eta_3(a, \lambda) = \int_0^{\infty} dx \frac{x^2 e^{-(1-a)2x^2\omega_L/\lambda}}{1+a^2x^2},$$

$$\eta_4(z, a, \lambda) = \int_0^{\infty} dx \frac{x^2 e^{-2a_1x - (1-a)2x^2\omega_L/\lambda}}{1+a^2x^2} \quad (15)$$

3 结果与讨论

为了清楚地看出光学极化子性质对磁场和耦合强度的依赖性, 讨论两种极限情形。

(1) 当电子无限接近晶体表面时, $z \rightarrow 0$ 则

$$\eta_1(a, \lambda) = \eta_2(z, a, \lambda) \quad (16)$$

$$\eta_3(a, \lambda) = \eta_4(z, a, \lambda) \quad (17)$$

将式(16)和(17)分别代入式(10)、(11)和(14), 得到振动频率、基态能量 $E_{0\parallel}$ 和第一激发能为

$$\lambda_0 = \frac{\omega_c}{2(1-a)} \rightarrow \infty \quad (18)$$

$$E_{0\parallel} = 0 \quad (19)$$

$$\Delta E_1 = \frac{E\omega_c}{4(1-a)} \rightarrow \infty \quad (20)$$

由式(18)~(20)可见, 电子接近表面运动时, 振动频率和第一激发能 ΔE_1 趋于无穷, 基态能量 $E_{0\parallel}$ 为零。这些结果的出现是由于接近表面时, 电子与体光学声子相互作用趋于弱耦合极限所致。

(2) 当电子远离晶体表面时, $z \rightarrow \infty$ 则

$$\eta_2(z, a, \lambda) = \eta_4(z, a, \lambda) = 0 \quad (21)$$

将式(21)分别代入式(10)、(11)和(14), 得到振动频率、基态能量 $E_{0\parallel}$ 和第一激发能分别为

$$1 - \frac{\omega_c^2}{4\lambda^2} + \alpha_L \left(\frac{\omega_L}{\lambda}\right)^2 \frac{\pi}{a} \left(\frac{1}{a} - 1\right)^2 e^{\left(\frac{1}{a}\right)^2 \frac{a\omega_c}{\lambda}} = 0 \quad (22)$$

$$E_{0\parallel} = \frac{E\lambda(1-a)^2}{2} + \frac{E\omega_c^2}{8\lambda} - \alpha_L E\omega_L \eta_1(a, \lambda) \quad (23)$$

$$\Delta E_1 = \frac{E\lambda}{2} + \frac{E\omega_c^2}{8\lambda} - \alpha_L E\omega_L^2 \frac{1}{\lambda} (1-a)^2 \eta_3(a, \lambda) \tag{24}$$

回旋共振频率 ω_c 和振动频率 λ 以 ω_L 为单位, 能量以 $E\omega_L$ 为单位。对式 (22)、(23) 和 (24) 进行数值计算, 得到极化子振动频率、基态能量 $E_{0||}$ 、第一激发能随耦合强度和磁场的变化规律。

图 1 表示振动频率 λ 随耦合强度和磁场强度的变化规律。当磁场强度保持不变时, 振动频率 λ 随耦合参数 a 的增大而增大, 原因是 a 增大时, 电子与晶格振动之间的相互作用减弱, 导致振动增强。当耦合参数 a 保持不变时, 振动频率 λ 随磁场强度的增强而增大, 源于回旋共振的增强。

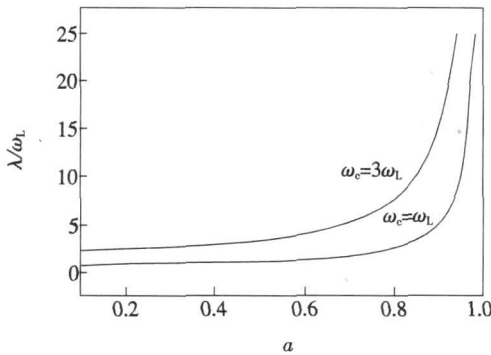


图 1 振动频率 λ 随耦合强度和磁场强度的变化规律
Fig 1 The relational curves of vibration frequency λ with coupling strength a and magnetic field strength ω_c .

图 2 表示电子在 xoy 平面内运动的基态能量 $E_{0||}$ 随耦合强度和磁场强度的变化规律。可见, 当磁场强度保持不变时, $E_{0||}$ 随耦合参数 a 的增大而增大, 源于耦合参数增大时, 晶格振动与电子之间的相互作用减弱, 相互作用能量的绝对值减小, $E_{0||}$ 增大。当耦合参数 a 不变时, $E_{0||}$ 随磁场强度的增大而增大, 源于电子与磁场之间的相互作用能增加所致。

图 3 表示第一激发能 ΔE_1 随耦合强度和磁场强度的变化规律。可见, 当磁场强度保持不变时, 随耦合参数 a 的增大而增大, ΔE_1 随磁场强度的增大而增大, 原因与 $E_{0||}$ 相同。

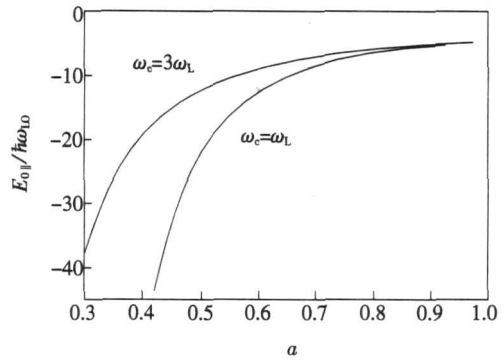


图 2 $E_{0||}$ 随耦合强度和磁场强度的变化规律
Fig 2 The relational curves of $E_{0||}$ with coupling strength and magnetic field strength

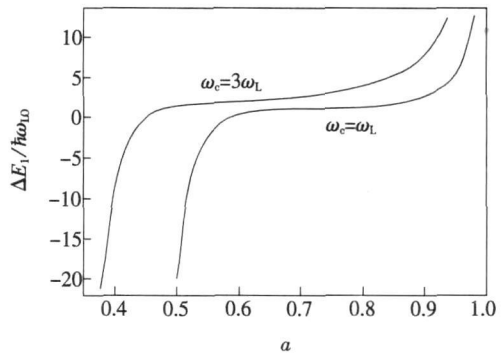


图 3 第一激发能 ΔE_1 随耦合强度和磁场强度的变化规律
Fig 3 The relational curves of ΔE_1 with coupling strength and magnetic field strength

4 结 论

采用线性组合算符和么正变换方法, 研究磁场和耦合强度对光学极化子性质的影响。结果表明: 当电子接近晶体表面时, 光学极化子的振动频率、基态能量和第一激发能仅与磁场有关, 且随磁场强度的增大而增大; 当电子远离晶体表面时, 基态能量和第一激发能与磁场强度和耦合参数均有关, 且随磁场强度和耦合参数的增加而增加。故耦合强度和磁场在不同情况对极化子性质有不同影响, 应区别对待。

参 考 文 献:

[1] Ibach H. Surface vibrations of silicon detected by low-energy electron spectroscopy [J]. *Phys Rev Lett*, 1971, 27 (5): 253-256
 [2] Huybrechts W J. Internal excited state of the optical polaron [J]. *J. Phys*, 1977, C10(19): 3761-3768
 [3] Kandemir B S, Altanhan T. Two-dimensional magnetopolarons with squeezed Landau states [J]. *J. Phys: Condens Matter*, 1997, 9(2): 427-437.

- [4] Mukhopadhyay S, Chatterjee A. Relaxed and effective-mass excited state of a quantum dot polaron [J]. *Phys Rev. B*, 1998, **58**(4): 2088-2093.
- [5] Zhu K D, Kobayashi T. Magnetic field effects on strong coupling polaron in quantum dots [J]. *Phys Lett A*, 1994, **190**(324): 337-340.
- [6] Zhou H Y, Gu S W. Energy levels of strong coupling magnetopolaron in quantum dot [J]. *J. Shanghai University* (上海大学学报), 2001, **5**(1): 40-43 (in Chinese).
- [7] Cheng J L, Wu M W, L C. Spin relaxation in GaAs quantum dots [J]. *Phys Rev. B*, 2004, **69**: 115318-7.
- [8] Zhao Cuihan, Ding Zhaohua, Xiao Jinglin. Renormalization mass of polaron in cylindrical quantum dot [J]. *Chin. J. Lum in.* (发光学报), 2005, **26**(2): 159-161 (in Chinese).
- [9] Ding Zhaohua, Zhao Cuihan, Xiao Jinglin. Effective mass of strong-coupling polaron in a parabolic quantum wire [J]. *Chin. J. Lum in.* (发光学报), 2005, **26**(2): 33-36 (in Chinese).
- [10] Chen Shihua, Xiao Jinglin. Properties of strong coupling polaron in quantum dot [J]. *Chin. J. Lum in.* (发光学报), 2005, **26**(1): 27-31 (in Chinese).
- [11] Zhao Cailan, Ding Zhaohua, Xiao Jinglin. The properties of weak-coupling magneto-polaron in cylindrical quantum dot [J]. *Chin. J. Semicond.* (半导体学报), 2005, **26**(10): 124-127 (in Chinese).

The Dependence of the Properties of Optical Polaron on Coupling Strength and Magnetic Field

ZHAO Cuihan¹, WANG Guo-sheng², DING Zhao-hua¹, XIAO Jing-lin¹

(1 College of Physics and Electronic Information, Inner Mongolia National University, Tongliao 028043 China;

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

Abstract A great deal of work on study of polaron properties in semiconductor surface and interface was performed since Ibach carried out low-energy electron diffraction experiments on ZnO and other semiconductor surface. Huybrechts proposed a linear combination operator method, by which the dependence of internal excited state properties of polaron on coupling strength was discussed. Kandmir *et al.* studied the properties of two-dimensional magnetopolaron by using bound Landau state method. Mukhopadhyay *et al.* calculated polaron correction of the first excited state of electron in parabolic quantum dot for different values of the electron-phonon coupling by using LLP method. Others also investigated the many relations between the properties of polaron and coupling strength. We discussed the dependence of the properties of optical polaron on coupling strength and magnetic field in this paper.

The varied relation of ground state energy and the first excited energy of optical polaron with coupling strength and magnetic field was derived by using the linear combination operator and unitary transformation methods. The numerical calculation indicates that the vibration frequency increase with increasing coupling parameter and magnetic field strength, because interaction between electron and crystal vibration falls and vibration increases with increasing coupling parameter and interaction between electron and magnetic field increases with increasing magnetic field strength. The numerical calculation also shows that the ground state energy and the first excited energy both increase with increasing coupling parameter and magnetic field strength, since interaction energy between electron and crystal vibration increase with increasing coupling parameter and interaction energy between electron and magnetic field increase with increasing magnetic field strength.

Key words optical polaron, magnetic field strength, coupling parameter