

文章编号:1673-5005(2007)06-0127-03

# 量子点中极化子的速率对光学声子平均数的影响

张鹏<sup>1</sup>, 肖景林<sup>2</sup>

(1. 中国石油大学 数理系, 北京 102249; 2. 内蒙古民族大学 物理系, 内蒙古 通辽 028043)

**摘要:**研究了量子点中极化子的性质。采用 Tokuda 改进的线性组合算符法、拉格朗日乘子法和变分法, 导出了量子点中极化子的振动频率和声子平均数, 讨论了在强弱耦合情况下极化子的速率对光学声子平均数的影响。研究结果表明, 光学声子平均数随极化子的速率增加而增大。

**关键词:**量子点; 极化子速率; 光学声子平均数

**中图分类号:** O 469 **文献标识码:** A

## Influence of velocity of polaron in quantum dots on the mean number of optical phonons

ZHANG Peng<sup>1</sup>, XIAO Jing-lin<sup>2</sup>

(1. Department of Mathematics and Physics in China University of Petroleum, Beijing 102249, China;

2. Department of Physics, Inner Mongolia National University, Tongliao 028043, Neimengu, China)

**Abstract:** The properties of polaron in quantum dots were investigated. The vibration frequency and the mean number of phonons of polaron in quantum dots were calculated by using Tokuda's improved linear combination operator and Lagrange multiplier and variational method. Influence of the velocity of the polaron on the mean number of optical phonons were discussed for strong-coupling and weak-coupling. The results show that the mean number of phonons increases with the velocity of the polaron increasing.

**Key words:** quantum dot; velocity of polaron; mean number of optical phonons

随着微观技术的不断发展,人们利用分子束外延(MBE)技术和金属有机化学气相沉积(MOCVD)等技术,已成功地制造出多种样式的量子点,由于量子点奇特的光学性质和输运特性引起了众多学者的重视,人们采用各种理论和实验方法对量子点中极化子的性质进行研究。Kandenmir等<sup>[1]</sup>用LLP方法研究了在磁场中极化子对束缚于抛物量子点中的电子影响,Zhu等<sup>[2-3]</sup>利用二级Rayleigh-schordinger微扰理论计算了抛物量子点中弱耦合极化子的基态能量与自能,后又采用Landu-pekar变分法研究了量子点中强耦合极化子电子周围的光学声子平均数<sup>[4]</sup>。Charrou等<sup>[5]</sup>在有效质量近似下采用变分方法研究了磁场对柱形量子点中氢杂质结合能的影响。Melnikov等<sup>[6-7]</sup>分别用绝热变分法和全耦合变分法

研究了电子—声子的相互作用对球形量子点中束缚极化子的影响。Chen等<sup>[8]</sup>采用精确对角化方法研究了GaAs量子点中的自旋弛豫现象。笔者以及王东民等<sup>[9-11]</sup>采用线性组合算符法和么正变换方法研究了在晶体中光学极化子的性质和在抛物量子点中强耦合极化子、束缚极化子的光学声子平均数。但是,关于量子点中极化子的速率对量子点性质的影响研究甚少。本文中采用Tokuda改进的线性组合算符法、拉格朗日乘子法和变分法,对量子点中极化子的速率对光学声子平均数的影响进行研究。

## 1 理论模型

在三维空间中,考虑电子在一个方向(设为 $z$ 方向)比另外两个方向受限强得多,因此只讨论电子

收稿日期:2007-04-28

基金项目:国家自然科学基金项目(10347004);中国石油大学(北京)校长基金资助项目(2005)

作者简介:张鹏(1963-),女(汉族),内蒙古通辽人,教授,硕士,从事凝聚态物理的理论研究。

在  $xoy$  平面上的运动。设单一量子点中的束缚势<sup>[12]</sup>为

$$V(\rho) = \frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2 \quad (1)$$

式中,  $m$  为裸带质量;  $\rho$  为二维位置矢量;  $\omega_0$  为量子点的受限强度。

电子-声子体系的哈密顿量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2\rho^2 + \sum_q \hbar\omega_{LO}b_q^\dagger b_q + \sum_q (V_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} b_q + h \cdot \mathbf{c}), \quad (2)$$

其中

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}, V_q = i\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{q}\right)\left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}}\right)^{1/4}\left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2},$$

$$\alpha = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}}\right)\left(\frac{2m\omega_{LO}}{\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right).$$

式中,  $h$  为普朗克常量;  $b_q^\dagger$  ( $b_q$ ) 是波矢为  $q$  的体纵光学(longitudinal optical) 声子的产生(湮灭)算符;  $\omega_{LO}$  是 LO 声子的频率;  $\mathbf{r} = (\rho, z)$  为电子的位置矢量;  $h \cdot \mathbf{c}$  是前一项的厄米共轭项;  $V$  为体积;  $\alpha$  为电子与声子的耦合常数;  $\epsilon_\infty, \epsilon_0$  分别为高频和静介电常数。

将哈密顿量进行两次么正变换

$$U_1 = \exp(-iA \sum_q \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} b_q^\dagger b_q),$$

$$U_2 = \exp(\sum_q f_q b_q^\dagger - f_q^* b_q). \quad (3)$$

式中,  $A$  为表征电子-LO 声子耦合强弱的物理量;  $f_q$  为变分参量。

对电子在  $xoy$  平面运动的动量和坐标引入改进的线性组合算符, 即

$$\begin{cases} P_j = \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} (B_j^* + B_j + P_{0j}), \\ \rho_j = i\left(\frac{\hbar}{2m\lambda}\right)^{1/2} (B_j - B_j^*), j = x, y, \end{cases} \quad (4)$$

其中  $\lambda$  和  $P_{0j}$  为变分参量, 则变换后的哈密顿量为

$$\begin{aligned} H'' = & U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 = \\ & \frac{\hbar\lambda}{4} \sum_j (B_j + B_j^* + P_{0j})^2 - \\ & \frac{A\hbar}{m} \sum_{q,j} (b_q^\dagger + f_q^*)(b_q + f_q) \left[ \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} (q_x(B_x + B_x^* + P_{0x}) + q_y(B_y + B_y^* + P_{0y})) \right] + \sum_q \hbar\omega_{LO}(b_q^\dagger + f_q^*)(b_q + f_q) + \frac{\hbar^2 A^2}{2m} \left[ \sum_q (b_q^\dagger + f_q^*)(b_q + f_q) q^2 \right] + \frac{\hbar\omega_0^2}{4\lambda} \sum_j (B_j - B_j^*)^2 + \sum_q \left[ V_q (b_q + f_q) \exp(i(1 - \right. \end{aligned}$$

$$\left. A)q_x z \right] \exp\left(- (1 - A)^2 \frac{\hbar q^2}{4m\lambda}\right) \exp\left(- (1 - A) \times \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} \sum_j q_j B_j^*\right) \exp\left((1 - A) \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} \sum_j q_j B_j\right) + h \cdot \mathbf{c} \Big]. \quad (5)$$

取基态波函数为  $|\psi\rangle = |\varphi(z)\rangle |0\rangle_B |0\rangle_b$ , 其中  $|0\rangle_b$  为零声子态,  $|0\rangle_B$  为极化子的真空态, 考虑系统在  $xoy$  平面的总动量

$$P_{||r} = P_{||} + \sum_q \hbar q b_q^\dagger b_q, \quad (6)$$

它与哈密顿量对易, 其本征值为守恒量, 在采用变分法时引入拉格朗日乘子以包括总动量守恒条件。下面计算  $U_2^{-1} U_1^{-1} (H'' - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{||r}) U_1 U_2$  对  $|0\rangle$  的平均值, 其中  $\mathbf{u}$  为拉格朗日乘子。

$$\begin{aligned} F(\mathbf{u}, P_0, \lambda, f_q) = & {}_B \langle 0 | {}_b \langle 0 | H'' - U_2^{-1} U_1^{-1} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{||r} U_1 U_2 | 0 \rangle_b | 0 \rangle_B = \frac{\hbar\lambda}{2} + \sum_q \left( \hbar\omega_{LO} + \frac{A^2 \hbar^2 q^2}{2m} \right) |f_q|^2 + \\ & \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 - A \left(\frac{\hbar\lambda}{2m}\right)^{1/2} \hbar \sum_q \mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_0 |f_q|^2 - \\ & \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 - \sum_q (1 - A) \hbar \mathbf{u} \cdot \mathbf{q} |f_q|^2 + \sum_q \left\{ V_q f_q \times \right. \\ & \left. \exp\left[(1 - A)^2 \frac{\hbar q^2}{4m\lambda}\right] \exp(iq_x z) + h \cdot \mathbf{c} \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

式中,  $\lambda$  为极化子振动频率。将式(7)对  $f_q$  变分, 经计算得到

$$\begin{aligned} F(\mathbf{u}, P_0, \lambda) = & \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 - \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 - \\ & \sum_q \frac{|V_q|^2 \exp\left(- (1 - A)^2 \frac{\hbar q^2}{2m\lambda}\right)}{\hbar\omega_{LO} + \frac{A^2 \hbar^2 q^2}{2m} - A\hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m}\right)^{1/2} \mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_0 - (1 - A) \hbar \mathbf{u} \cdot \mathbf{q}} \end{aligned} \quad (8)$$

电子周围平均声子数为

$$\begin{aligned} \bar{N} = & \sum_q |f_q|^2 = \\ & \sum_q \frac{|V_q|^2 \exp\left(- (1 - A)^2 \frac{\hbar q^2}{2m\lambda}\right)}{\left[ \hbar\omega_{LO} + \frac{A^2 \hbar^2 q^2}{2m} - A\hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m}\right)^{1/2} \mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_0 - (1 - A) \hbar \mathbf{u} \cdot \mathbf{q} \right]^2}. \quad (9) \end{aligned}$$

## 2 结果讨论与数值计算

分强、弱耦合两种极限情况进行讨论。

(1) 弱耦合情况。弱耦合时,  $A = 1$ , 代入式(8)得

$$F(\mathbf{u}, P_0, \lambda) = \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 -$$

$$\left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}} u \cdot P_0 - \alpha \hbar\omega_{LO} - \frac{1}{12}\alpha \hbar\lambda P_0^2. \quad (10)$$

利用变分法得到  $P_0, \lambda = \lambda_0$ , 代入式(10)得

$$F = \hbar\lambda_0 - \alpha \hbar\omega_{LO} - \frac{1}{2}m^* u^2, \quad (11)$$

其中

$$m^* = m\left(1 + \frac{\alpha}{3}\right). \quad (12)$$

式中,  $m^*$  为极化子有效质量。

电子周围光学声子平均数为

$$N = \frac{1}{2}\alpha + \frac{\alpha}{2\pi\left(1 - \frac{1}{3}\alpha\right)^2} \frac{m^* u^2}{\hbar\omega_{LO}}. \quad (13)$$

由式(13) 可看到弱耦合情况下声子平均数与电子-LO 声子的耦合常数、声子频率、极化子的速率有关。为进一步了解声子平均数受极化子速率影响的程度, 进行了数值计算。设极化子半径为  $r_0 =$

$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}}}$ , 且取极化子单位  $\hbar = 2m = \omega_{LO} = 1$ , 图1中给出了在弱耦合情况下量子点中极化子的声子平均数与速率的变化关系。由图易看出, 声子平均数随速率的增加而变大, 但极化子速率很小时, 对声子平均数的影响很小。

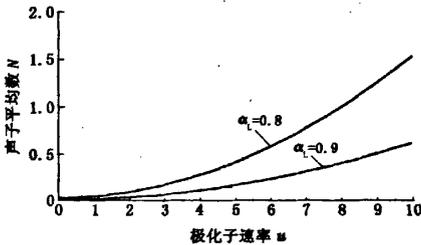


图1 弱耦合情况下声子平均数  $N$  与极化子速率  $u$  的关系

(2) 强耦合情况。强耦合时,  $A = 0$ , 代入式(8)

得

$$F(u, P_0, \lambda) = \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar\lambda}{4} P_0^2 - \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}} u \cdot P_0 - \frac{\alpha \hbar\omega_{LO}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\lambda}{\omega_{LO}}} - \frac{1}{3} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{\lambda^3}{\omega_{LO}^3}} m u^2. \quad (14)$$

利用变分法得到  $P_0$ , 将  $\lambda = \lambda_0$  代入式(14)得

$$F = \frac{\hbar\lambda_0}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda_0} - \frac{1}{2}m^* u^2 - \frac{\alpha \hbar\omega_{LO}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda_0}{\omega_{LO}}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (15)$$

其中

$$m^* = m \left[ 1 + \frac{2}{3} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda_0}{\omega_{LO}}\right)^{\frac{3}{2}} \right]. \quad (16)$$

电子周围平均声子数为

$$N = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda}{\omega_{LO}}\right)^{\frac{1}{2}} + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda}{\omega_{LO}}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{m^* u^2}{\hbar\omega_{LO}}. \quad (17)$$

设量子点的有效受限长度为

$$l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}, \quad (18)$$

由式(17) 可看到强耦合情况下, 平均声子数与电子-LO 声子的耦合常数、声子频率、极化子频率、有效受限长度和极化子速率都有关系。为进一步了解其受极化子速率的影响, 仍取极化子单位  $\hbar = 2m = \omega_{LO} = 1$ , 进行了数值计算。图2中给出了在强耦合( $\alpha_L = 5$ ) 情况下, 取不同的有效受限长度( $l_0 = 0.8, l_0 = 0.9$ ) 时, 声子的平均数与极化子速率的变化关系。由曲线可知, 声子平均数随极化子速率的增加而变大, 这是因为当极化子速率增大时, 电子与更多的声子相互作用而导致声子平均数增大, 且即使极化子速率很小, 对声子平均数的影响也是不可忽略的。

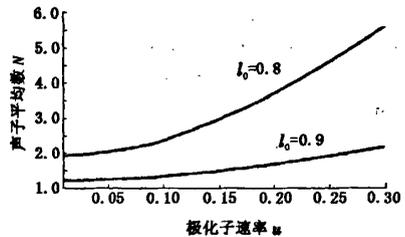


图2 强耦合且有效受限长度不同情况下声子平均数  $N$  与极化子速率  $u$  的关系

参考文献:

- [1] KANDEMIR B S, ALTANHANI T. Polaron effect on an anisotropic quantum dot in a magnetic field [J]. Phys Rev B, 1999, 60(7):4834-4849.
- [2] ZHU K D, GU S W. Polaronic states in a harmonic quantum dot [J]. Phys Lett A, 1992, 163:435-438.
- [3] ZHU K D, GU S W. The polaron self-energy in a parabolic quantum dot [J]. Commun Theor Phys, 1993, 19(1):27-30.
- [4] ZHU K D, KOBAYASHI T. Magnetic field effects on strong coupling polarons in quantum dots [J]. Phys Lett A, 1994, 190:337-340.
- [5] CHARROUR R, BOUHASSOUNE M, FLIYOU M, et al. Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in cylindrical quantum dot [J]. Physica B, 2000, 293:137-143.

(下转第134页)

- WANG Qing-he, CHANG Qin, LÜ Wei-ran. Value distribution of differential monomials[J]. Journal of China University of Petroleum (Edition of Natural Science), 2006, 30 (5): 135-137.
- [5] CLUNIE J. On a result of Hayman[J]. J London Math Soc, 1967, 46: 389-392.
- [6] FANG M, HUA X. Entire functions that share one value [J]. Journal of Nanjing University Mathematical Biquarterly, 1996, 13(1): 44-48.
- [7] YANG C, HUA X. Uniqueness and value-sharing of meromorphic functions[J]. Ann Acad Sci Fenn Math, 1997, 22: 395-406.
- [8] XU Y, QU H. Entire functions sharing one value IM[J]. Indian J Pure Appl Math, 2000, 31: 849-855.
- [9] YI H. Meromorphic functions that share one or two values [J]. Complex Variable, 1995, 28: 1-11.
- [10] YANG C. On deficiencies of differential polynomials II [J]. Math Z, 1972, 125: 107-112.

(编辑 修荣荣)

(上接第129页)

- [6] MELNIKOV D V, FOWLER W B. Bound polaron in a spherical quantum dot strong electron-phonon coupling case [J]. Phys Rev B, 2001, 63 (5): 165302-1-7.
- [7] MELNIKOV D V, FOWLER W B. Bound polaron in a spherical quantum dot the all-coupling variational approach [J]. Phys Rev B, 2001, 64: 195335-1-12.
- [8] CHENG J L, WU M W, LU C. Spin relaxation in GaAs quantum dots [J]. Phys Rev B, 2004, 69: 115318-1-7.
- [9] 张鹏, 贾金萍. 磁场中光学极化子的性质研究[J]. 石油大学学报: 自然科学版, 2005, 29(2): 141-144.  
ZHANG Peng, JIA Jin-ping. Study of characteristics of optical polaron in magnetic field [J]. Journal of the University of Petroleum, China (Edition of Natural Science), 2005, 29 (2): 141-144.
- [10] 肖景林, 王立国. 量子点中强耦合极化子性质[J]. 光子·激光, 2003, 14(8): 886-888.
- XIAO Jing-lin, WANG Li-guo. The properties of strong-coupling polaron in quantum dots[J]. Journal of Optoelectronics · Laser, 2003, 14(8): 886-888.
- [11] 王东民, 肖伟, 陈英杰, 等. 抛物量子点中强耦合束缚极化子的光学声子平均数[J]. 发光学报, 2005, 26(4): 426-429.  
WANG Dong-min, XIAO Wei, CHEN Ying-jie, et al. Average number of optical phonons of strong-coupling bound polaron in a parabolic quantum dot[J]. Chinese Journal of Luminescence, 2005, 26(4): 426-429.
- [12] ZHU K D, GU S W. Cyclotron resonance of magnetopolarons in a parabolic quantum dot in strong magnetic field [J]. Phys Rev B, 1993, 47(19): 12941-12944.

(编辑 修荣荣)

## “重质油高效转化的绿色化学与工程”入选教育部创新团队计划

近日,教育部公布了2007年度“长江学者与创新团队发展计划”创新团队入选名单(教技函[2007]68号文)。以中国石油大学(华东)化学化工学院刘晨光教授为带头人的“重质油高效转化的绿色化学与工程”创新团队获得入选立项建设。

“重质油高效转化的绿色化学与工程”创新团队依托中国石油大学化学工程与技术一级博士点学科(拥有化学工艺国家级重点学科、重质油国家重点实验室和油气加工新技术教育部工程研究中心、中国石油天然气集团公司催化重点实验室等),以重质油化学、新材料合成、过程强化研究为基础,通过对重质油结构和转化机理的新认识、催化剂制备和过程强化方法的创新,开发成功具有自主知识产权的重质油高效清洁加工新技术,实现节约资源、降低污染物排放的目标。重点研究方向包括重质油高效转化的绿色化学基础、催化剂制备理论与方法、重质油高效转化工程研究与技术、重质油及其组分的高附加值产品开发等。

据了解,2007年度教育部在全国高校范围内共计资助63个创新团队,资助期限为3年。“长江学者与创新团队发展计划”于2004年首次设立,为教育部迄今为止启动的最高层次的平台建设计划,属《高等学校“高层次创造性人才计划”实施方案》中人才培养和支持体系中的第一层次。该计划自实施以来,在培养和汇聚优秀拔尖创新人才和创新团队、增强高校自主创新能力方面成效显著。

(摘自中国石油大学校园网)