

纳米材料中电子的声子效应

马新军 著

 哈尔滨工程大学出版社
Harbin Engineering University Press

纳米材料中电子的声子效应

马新军 著

中国科学院
物理研究所
马新军 著
纳米材料
声学效应
马新军 著

出版社

Harbin Engineering University Press

内 容 简 介

本书以纳米材料中的量子点为主,介绍了量子点的量子尺寸效应和光电特性,并在此基础上详细介绍了量子点中强、弱耦合极化子的性质,并且考虑了自旋 Rashba 效应,以及处理这类问题所用的基本方法、关键步骤、实现手段和实验对比。主要内容包括:Rashba 效应影响下量子点中极化子的性质;自旋对非对称量子点中强耦合磁极化子性质的影响;自旋对非对称量子点中强耦合磁极化子性质的影响。

本书给出了有关于纳米材料中极化子性质以及自旋 Rashba 效应处理的理论方法,为广大科研人员和从事这一方面的研究人员提供了一定的参考。书中所有内容论证明确,并且邀请了相关方面的专家对内容审阅。

本书理论方法实用性较强,可作为凝聚态物理、半导体科学、材料科学专业及其他相关专业的高年级本科生和研究生使用,也可作为科研人员研究纳米材料的极化子和自旋 Rashba 效应的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

纳米材料中电子的声子效应/马新军著. —哈尔滨:
哈尔滨工程大学出版社,2018.3
ISBN 978-7-5661-1856-1

I. ①纳… II. ①马… III. ①纳米材料-极化声子-研究 IV. ①O426.5

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 061858 号

选题策划 王洪菲
责任编辑 张植朴
封面设计 刘长友

出版发行 哈尔滨工程大学出版社
社 址 哈尔滨市南岗区南通大街 145 号
邮政编码 150001
发行电话 0451-82519328
传 真 0451-82519699
经 销 新华书店
印 刷 北京中石油彩色印刷有限责任公司
开 本 787mm×960mm 1/16
印 张 5
字 数 112 千字
版 次 2018 年 3 月第 1 版
印 次 2018 年 3 月第 1 次印刷
定 价 25.00 元

<http://www.hrbeupress.com>

E-mail: heupress@hrbeu.edu.cn

前 言

纳米材料是由几百个原子或分子形成结晶粒度为纳米级($1 \sim 100 \text{ nm}$)的一种具备特殊电子和声子效应结构的材料,即三维空间中至少有一个维度强受限,包括零维材料量子点,一维材料量子线,二维材料量子阱以及其他维度受限的纳米材料。本书内容分为三部分:第一章,Rashba 效应影响下量子点中极化子的性质。电子既有电荷又具有自旋,电子自旋相关的运输特性最近得到迅速的发展。围绕电子自旋的控制、输运、测量等的研究已经成为研究的热点。本章采用改进的线性组合算符和幺正变换的方法,研究了 Rashba 效应对半导体量子点中极化子性质的影响。第二章,本章采用改进的线性组合算符和幺正变换方法,研究非对称量子点中强耦合磁极化子的振动频率和声子平均数,以及自旋对非对称量子点中强耦合磁极化子性质的影响,并且计算了非对称量子点中强耦合磁极化子的振动频率、相互作用能、有效质量和声子平均数随电子自旋、电子-声子耦合强度、磁场回旋频率、极化子速率和量子点横向和纵向有效受限长度的变化关系。第三章,其他纳米材料中极化子的性质。本章共分为三节:第一节描述了非对称 GaAs 高斯势量子阱弱耦合极化子的性质;第二节叙述了非对称高斯量子阱弱耦合磁场性质;第三节计算了 RbCl 量子点库仑场量子比特性质;第四节表述了半导体量子点极化子的 Rashba 效应的性质。由此可知纳米材料光电器件中有着广泛的研究应用价值,因此,纳米结构的电子的声子效应成为当前该领域研究的热点。

本书由马新军著,由肖景林教授审阅。

著 者
2017 年 11 月

目 录

第 1 章 Rashba 效应影响下量子点中极化子的性质	1
1.1 引言	1
1.2 Rashba 效应影响下半导体量子点中强耦合极化子的性质	2
1.3 Rashba 效应影响下半导体量子点中弱耦合束缚极化子的性质	9
参考文献	17
第 2 章 自旋对非对称量子点中强耦合磁极化子性质的影响	20
2.1 绪论	20
2.2 非对称量子点中强耦合磁极化子的振动频率和声子平均数	23
2.3 自旋对非对称量子点中强耦合磁极化子性质的影响	30
2.4 结论	40
参考文献	40
第 3 章 其他纳米结构中极化子的性质	46
3.1 非对称高斯束缚势 GaAs 量子阱的弱耦合极化子的性质	46
3.2 磁场对非对称高斯束缚势量子阱中弱耦合极化子的影响	50
3.3 库仑杂质势 RbCl 量子比特	54
3.4 自旋轨道相互作用影响的半导体量子点中极化子的性质	59
参考文献	66

第 1 章 Rashba 效应影响下量子点中极化子的性质

1.1 引言

电子既有电荷又具有自旋,以电子电荷为基础的微电子在 21 世纪取得了巨大的成功,但是在传统的微电子器件中,电子的自旋却一直被人们忽视。直到最近十多年来,与电子自旋相关的运输特性才得到研究者的重视,并得到迅速发展。现在围绕电子自旋的控制、输运、测量等的研究已经发展成为一门全新的学科——自旋电子学。

目前,自旋电子学(Spintronic)是物理学中最热门的研究领域之一,它不但是一个基本的物理问题,而且还有巨大的应用前景。人们应用电子的电荷性开创了微电子学,各种基于电荷性的半导体微电子器件充斥着人们的日常生活。有理由相信基于自旋的器件也同样会改变人们的生活。利用自旋的电子器件有希望实现同时利用电子的电荷和自旋来进行信息的传输及储存,这会大大提高现有电子器件的工作速度和效率。它们可以应用在自旋三极管(spin transistor)、自旋过滤器(spin filters)和自旋波导(spin waveguides)等电子器件中。利用电子自旋还可能制备出具有全新物理性能的电子器件,甚至实现量子存储和量子计算。

虽然自 1988 年以来,研究者对自旋电子学进行了广泛的研究,取得了丰硕的成果,并且在此基础上部分磁电子器件已经商业化,但是总体来看,自旋电子学的研究还处于探索、研究的初级阶段,还有许多工作需要进一步研究,例如,非磁金属、半导体、二维电子气体中自旋电子注入;自旋在材料中的弛豫;自旋的控制和检测以及新型自旋材料的制备等。这些工作的进一步发展,不但有助于对微观物理世界的认识,更有重要的研究价值,能够推动新型电子器件的研究和开发。它对信息技术的潜在影响和本身的应用价值引起了人们的广泛关注,因此成为凝聚态物理中一个活跃的研究领域。

自旋电子学的基础就是不同自旋态的电子在材料中的浓度不同,也就是自旋在能量上分裂了。显然,外加磁场可以产生这种分裂(塞曼分裂),另外,如果晶体的结构反演对称性遭到破坏,即使没有外加磁场,电子也会有自旋分裂。反演对称性的缺失会导致晶体内部的电场梯度,从而导致自旋-轨道耦合。自旋-轨道相互作用使得电子自旋自由度与轨道发生耦合,因此通过改变电场或门电压可以有效地调节和控制电子自旋从而使得运输和自旋现象相互依赖。反演对称性的缺失主要有两种来源:一种是晶体的非中心对称(bulk inversion asymmetry),它导致非均匀的晶体场,称为 Dresselhaus 项,典型的例子是具有闪锌矿结构的材料;另一种是结构的非中心对称(structural inversion asymmetry),它能导致能带

的倾斜,这种自旋轨道耦合叫作 Rashba 自旋轨道耦合,其本质是外加电场对运动电子的自旋作用。Rashba 自旋-轨道相互作用引起的分裂并不是简单的分裂,有时掺杂着其他分裂,包括 Zeeman 分裂,虽然两种分裂的方向不同,但如何区分两者的贡献仍然有一些争议。后者与前者有根本的区别,Zeeman 分裂需要发生时间反演非对称,而自旋-轨道相互作用产生于空间反演非对称。当前,研究自旋电子学的一个重要分支就是:在半导体量子点或半导体隧穿结等介观系统模型上研究 Rashba 和 Dresselhaus 自旋-轨道耦合效应。在窄禁带半导体中,主要来自结构反演不对称,也就是所谓的 Rashba 自旋轨道分裂。这效应在体材料中是很小的,只有在窄禁带半导体的纳米结构(量子线、量子点)中才明显。在这种结构中,量子限制效应、导带和价带之间的强相互作用以及自旋轨道耦合的共同相互作用,使得 Rashba 效应增大。自旋-轨道相互作用强度不仅与材料有关,而且还受外部电场控制。大量实验表明量子点能被描述为一个束缚势限制下的二维电子系统,束缚势通常是 hard-wall 和简谐势,自旋-轨道相互作用对量子点的影响主要是用微扰或数值模拟的方法。Bulgakov 和 Sadreev 在零磁场情况和 hard-wall 势下进行了精确求解。E. Tsitsvili 等人从量子点中单电子的 Schrödinger 方程出发精确求解了在磁场、自旋轨道耦合和 hard-wall 限制势共同作用下电子的波函数、能级和自旋反向弛豫时间。M. Governale 研究了量子点中的 Rashba 自旋轨道耦合。S. Bandyopadhyay 研究了基于量子点中 Rashba 效应的自聚合纳米电子量子计算机和 Rashba 效应对有外磁场影的不对称量子点的影响。Tapash 和 Pekka 深入研究了 Bychkov-Rashba 效应影响下用量子点中几个电子的相互作用。A. Reyno、Gonzalo Usaj、M. J. Sanchez 和 C. A. Balseiro 研究了磁场和 Rashba 效应影响下二维电子气体的边界态。O. Vosko、C. P. Lee 和 O. Tretyak 研究了自旋轨道相互作用下柱型量子点的能谱。

Rashba 效应对电子系统的影响领域的研究工作已经做了很多,但在极化子领域的研究比较少。本书采用改进的线性组合算符和幺正变换的方法,研究了 Rashba 效应对半导体量子点中极化子性质的影响。

1.2 Rashba 效应影响下半导体量子点中强耦合极化子的性质

在本节中,从电子-声子相互作用的哈密顿量出发,研究了 Rashba 效应影响下半导体量子点中强耦合极化子的性质,并对 RbCl 半导体材料量子点进行了数值计算从而得到了一些理论结果。

1.2.1 理论与模型

因电子在一个方向(设 z 方向)比另外两个方向受限强得多,所以只考虑电子在 x, y 平面上运动。考虑 Rashba 效应对系统的影响,电子-声子体系的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\rho) + H_{\text{ph}} + H_{\text{ph-e}} + H_{\text{so}} \quad (1.1)$$

第一项为电子的动能,第二项设单电子半导体量子点中的束缚势为抛物形势

$$V(\rho) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \rho^2 \quad (1.1a)$$

式中 m ——带质量;

ρ ——二维坐标矢量;

ω_0 ——量子点在 xoy 平面的特征频率,并定义为量子点的受限强度。

声子的哈密顿量 H_{ph} 为

$$H_{\text{ph}} = \sum_q \hbar \omega_{\text{LO}} b_q^\dagger b_q \quad (1.1b)$$

式中 $b^\dagger(b)$ ——波矢为 $\mathbf{q}(\mathbf{q} = q_{//}, q_z)$ 的体纵光学声子的产生(湮灭)算符。

电子和声子的相互作用哈密顿量 $H_{\text{ph-e}}$ 为

$$H_{\text{ph-e}} = \sum_q [V_q \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) b_q + \text{h. c.}] \quad (1.1c)$$

$\mathbf{r} = (\rho, z)$ 为电子坐标矢量,相互作用的傅里叶系数为

$$V_q = i \frac{\hbar \omega_s}{q} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{\text{LO}}} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.2a)$$

$$\alpha = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{\text{LO}}} \right) \left(\frac{2m\omega_{\text{LO}}}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \quad (1.2b)$$

式中 $\varepsilon_\infty, \varepsilon_0$ ——半导体高频和静态介电常数;

α ——电子和 LO 的耦合强度;

V ——晶体的体积。

Rashba 效应影响下单电子的哈密顿量为

$$H_{\text{so}} = \frac{\alpha_R}{\hbar} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) \quad (1.3)$$

式中 σ_x, σ_y ——泡利自旋算符。

α_R 为 Rashba 自旋轨道耦合常数其与电场的期待值 $\langle E \rangle$ 呈线性关系。在半导体材料中,与许多结构因素有关,例如几何结构。 $\alpha_R = c \langle E \rangle$, 系数 c 与带宽和有效质量成反比。在量子点异质结构中 Rashba 效应通常占主导地位。这里我们选择 Rashba 项,忽略 Dresselhaus 项。

进行么正变换

$$U = \exp \left(\sum_q (b_q^\dagger f_q - b_q f_q^*) \right) \quad (1.4)$$

式中 $f_q(f_q^*)$ ——变分函数。

对电子在 xoy 平面运动的动量和坐标引进线性组合算符

$$P_j = \left(\frac{m\hbar\lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (a_j + a_j^* + P_{0j}) \quad (1.5a)$$

$$\rho_j = i \left(\frac{\hbar}{2m\lambda} \right)^{\frac{1}{2}} (a_j - a_j^*) \quad (1.5b)$$

$$j = x, y \quad (1.5c)$$

式中 λ ——变分参量,则哈密顿量变为

$$H' = H'_{//} + \frac{P_z^2}{2m} \quad (1.6)$$

令基态波函数为

$$|\Psi\rangle = |\varphi(Z)\rangle (a\chi_{\frac{1}{2}} + b\chi_{-\frac{1}{2}}) |0\rangle_b |0\rangle_a \quad (1.7)$$

式中 $|\varphi(Z)\rangle$ ——电子 z 方向的波函数,可将其看成只在无限薄的狭层内运动,所以

$$|\langle\varphi(Z)|\varphi(Z)\rangle|^2 = \delta(Z);$$

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{——自旋向上、向下态, } a, b \text{ 为常数;}$$

$|0\rangle_b$ ——零声子态;

$|0\rangle_a$ ——极化子的基态。

由 $b_q|0\rangle_b = 0, a_j|0\rangle_a = 0$ 确定。

系统在 xoy 平面的总动量为

$$\mathbf{P}_{//T} = \mathbf{P}_{//} + \sum_q b_q^* b_q \hbar \mathbf{q}_{//} \quad (1.8)$$

计算 $U^{-1}(H'_{//} - \mathbf{P}_{//T} \cdot \mathbf{u})U$ 对态 $|0\rangle_b |0\rangle_a$ 的平均值,其中 $\mathbf{u}$ 为拉格朗日乘子。(1.6) 式对 $|\psi\rangle$ 的久期值为 $F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q) = \langle\psi| (H'_{//} - \mathbf{P}_{//T} \cdot \mathbf{u}) |\psi\rangle$, $F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q)$ 对 λ, f_q 的变分极值给出量子点中弱耦合束缚极化子的基态能量上限 $E_{0\pm}$, 即

$$E_{0\pm} = \min [F_{\pm}(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q)] \quad (1.9)$$

$$F_{\pm}(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q) = {}_a\langle 0 | {}_b\langle 0 | U^{-1} (H'_{//} - \mathbf{P}_{//T} \cdot \mathbf{u}) U | 0 \rangle_b | 0 \rangle_a \quad (1.10)$$

上式对 f_q 变分可得到 f_q^* , 再代入(1.10)式,可得

$$F_{\pm}(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda) = \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\lambda}{4} \mathbf{P}_0^2 + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} - \left(\frac{m\hbar\lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 \pm \frac{\alpha_R}{\hbar} \left(\frac{m\hbar\lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{P}_0 - \sum_q \frac{|V_q|^2 \exp\left(-\frac{\hbar q^2}{2m\lambda}\right)}{\hbar\omega_{LO} - \hbar\mathbf{u} \cdot \mathbf{q}} \quad (1.11)$$

将式(1.11)最后一项求和变积分, F 对 $\mathbf{P}_0$ 求变分可得出 $\mathbf{P}_0$, 再代入式(1.11)可得

$$F_{\pm}(\mathbf{u}, \lambda) = \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} - \frac{m\mathbf{u}^2}{2} - \frac{\alpha_R^2 m}{2\hbar^2} \pm \frac{\alpha_R}{\hbar} m\mathbf{u} - \frac{\alpha\hbar\sqrt{\lambda}\omega_{LO}^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{3} \frac{u^2 m\lambda}{\hbar\omega_{LO}^2} \right) \quad (1.12)$$

$F_{\pm}$ 对 λ 的变分, $\frac{\partial H_{\text{int}}}{\partial \lambda} = 0$, 可得到量子点中强耦合束缚极化子振动频率满足的方程

$$\lambda^2 - a \sqrt{\frac{\omega_{\text{LO}}}{\pi}} \lambda^{\frac{3}{2}} - \omega_0^2 = 0 \quad (1.13)$$

式(1.13)方程解为

$$\lambda = \lambda_0 \quad (1.14)$$

量子点中强耦合极化子的基态分裂能表示为

$$E_{0\pm} = \frac{\hbar\lambda_0}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda_0} - \frac{mu^2}{2} - \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m \pm \frac{\alpha_R}{\hbar}mu - \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\lambda_0}\omega_{\text{LO}}^{\frac{1}{2}}}{\omega_{\text{LO}}} \left(1 + \frac{1}{3} \frac{u^2 m \lambda_0}{\hbar\omega_{\text{LO}}^2}\right) \quad (1.15)$$

零磁场下自旋分裂能表示为

$$E_{\text{so}} = \pm \frac{\alpha_R}{\hbar}mu - \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m \quad (1.16)$$

式中 $\pm \frac{\alpha_R}{\hbar}mu$ ——零磁场下电子的自旋分裂能, 根据德布罗意关系 $p = mu = \hbar k$, 所以

$$\pm \frac{\alpha_R}{\hbar}mu = \pm \alpha_R k \text{ 与文献[17]得到的结论相同;}$$

$-\frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m$ ——考虑声子作用而产生的附加能量。

量子点中强耦合极化子的动量期待值

$$\bar{P}_{//} = m \left[1 \pm \frac{2\alpha_R}{\hbar u} + \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda_0}{\omega_{\text{LO}}} \right)^{\frac{3}{2}} \right] u \quad (1.17)$$

极化子的有效质量为

$$m_z^* = m \left[1 \pm \frac{2\alpha_R}{\hbar u} + \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\lambda_0}{\omega_{\text{LO}}} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (1.18)$$

式中 u ——慢电子速度。

量子点中强耦合极化子的有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} \quad (1.19)$$

$$H_{\text{kin}} = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{P_{//}^2}{2m^*} \quad (1.20)$$

$$H_{\text{int}} = \frac{\hbar\lambda_0}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda_0} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha \hbar \omega_{\text{LO}} \left(\frac{\lambda_0}{\omega_{\text{LO}}} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m \quad (1.21)$$

式(1.20)和式(1.21)分别为量子点中强耦合极化子的动能和相互作用能。

由式(1.13)、式(1.18)和式(1.21)不难看出, 半导体抛物量子点中强耦合极化子的振

动频率 λ_0 、相互作用能 H_{im} 和有效质量 m^* 不仅与 LO 声子的频率、电子 - 声子耦合强度 α 、量子点的受限强度 ω_0 有关, 而且有效质量 m^* 和相互作用能 H_{im} 还与 Rashba 自旋 - 轨道耦合常数 α_R 有关。

1.2.2 结果与讨论

为了更清楚地说明 Rashba 自旋 - 轨道耦合相互作用、受限强度和电子 - 声子耦合强度对半导体抛物量子点中强耦合极化子性质的影响, 选 RbCl 材料进行数值计算。所用材料的参数为: $\varepsilon_0 = 4.58$ 、 $\varepsilon_\infty = 2.20$ 、 $\hbar\omega_{\text{LO}} = 22.317 \text{ meV}$ 、 $\omega_{\text{LO}} = 3.39 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ 。

如图 1.1 所示为强耦合极化子的基态能量 E_b ($\alpha_R = 0$) (图中表示为实线) 和基态分裂能 $E_{0\pm}$ (图中表示为虚线) 随振动频率 λ_0 的曲线关系。假设 $\alpha_R = 20 \text{ meVnm}$, $u = 2 \times 10^4 \text{ m/s}$ 。由图 1.1 我们看出 Rashba 自旋 - 轨道相互作用使极化子的基态能量分裂成两支, 随振动频率 λ_0 的增加, 强耦合极化子的基态能量 E_b 和基态分裂能 $E_{0\pm}$ 迅速增大, 但每一支不是分别代表极化子自旋向上、向下的分裂能, 而是由极化子自旋向上、向下的共同作用, 是不同自旋态的电子在量子点中的浓度不同, 也就是自旋在能态上分裂了, 导致极化子的基态能量产生分裂。Rashba 自旋 - 轨道相互作用, 由于晶体的结构反演不对称性遭到破坏, 可以产生与垂直二维电子气的方向施加的电场, 运动电子通过感知到电场的存在产生一个有效磁场, 这个磁场也在二维平面内, 与电子动量相垂直, 电子自旋 - 轨道相互作用产生了一个零磁场下各向同性的自旋分裂能。因此, Rashba 自旋分裂能不同于强磁场下的简单自旋分裂, 而是一个复杂的分裂。当材料选定有效质量和禁带宽度不可改变时, 则系数 c 可以看作常数, 耦合常数 α_R 的变化依靠于外加电场或电压, 改变有效电场, 从而 α_R 可以被控制。 α_R 的取值范围在 $10^{-12} \sim 10^{-11} \text{ meVnm}$ 。当耦合常数 α_R 非常小时, 自旋分裂能占极化子基态能量不到 1%, 当耦合常数非常大, 例如取 $\alpha_R = 20 \text{ meVnm}$, 自旋分裂能 E_{so} 约为 6.05 meV, 占极化子基态能量的 6.05%。由于声子的存在使得粒子总能量降低, 所以极化子比电子状态更稳定, 从而极化子的分裂态更稳定。所以, Rashba 自旋轨道相互作用不可忽略。

如图 1.2 所示为 RbCl 晶体抛物量子点强耦合极化子的受限强度 ω_0 随振动频率 λ_0 的关系变化曲线。由图可看出, 随着量子点受限强度的增加, 极化子的振动频率迅速加快。这是由于量子点限定势(抛物势)的存在, 限制了电子的运动随着限定势(ω_0)的增加, 即 ρ 的减小, 以声子为媒介的电子的热运动能量和电子 - 声子之间相互作用因粒子运动范围缩小而增强, 导致极化子振动频率加快, 使其表现出新奇的量子尺寸效应。

如图 1.3 所示为 RbCl 晶体中抛物量子点强耦合极化子的振动频率 λ_0 和有效质量 m^*/m 的关系变化曲线, 假设 $\alpha_R = 20 \text{ meVnm}$ (图中虚线表示 $\alpha_R = 0$ 的情况), 图中表明随着量子点振动频率的增加, 极化子的有效质量 m^*/m 迅速增加。正如我们所知, 电子和声子的相互作用使得电子的质量发生改变, 而 Rashba 自旋 - 轨道相互作用是由于不同自旋态的

电子在材料中的浓度不同,也就是自旋在能量上分裂了。这种能量的分裂的结果导致极化子的有效质量产生分裂。

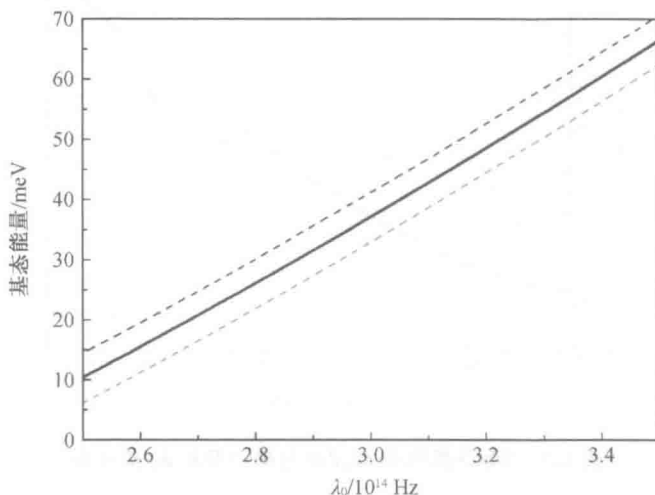


图 1.1 RbCl 晶体中极化子的基态能 E_b (图中表示为实线) 和极化子的基态自旋分裂能 $E_{0\pm}$ (图中表示为虚线) 随振动频率 λ_0 的变化规律

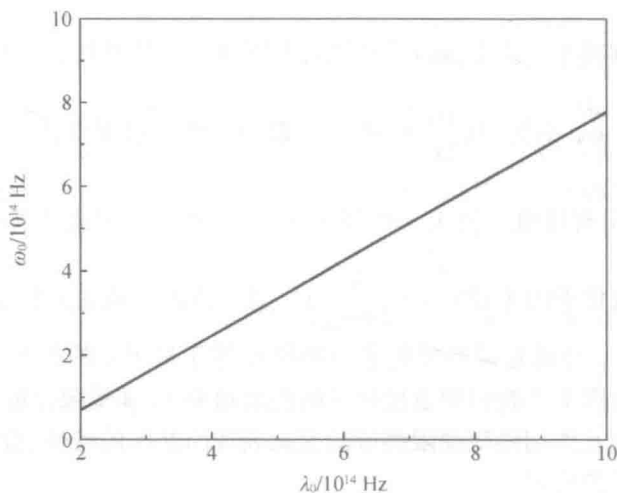
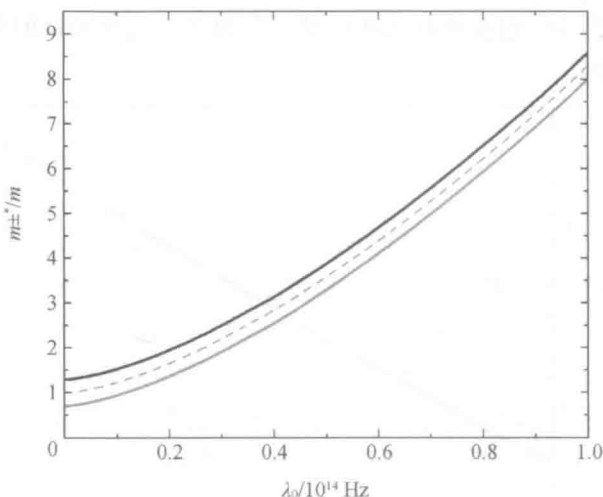


图 1.2 RbCl 晶体中受限强度 ω_0 与振动频率 λ_0 的关系


 图 1.3 RbCl 晶体中 m^*/m 与振动频率 λ_0 的关系

如图 1.4 所示为在 RbCl 半导体抛物量子点中,强耦合极化子的相互作用能 H_{int} 随极化子的振动频率 λ_0 的变化关系,由图可看出,随振动频率 λ_0 的增加,极化子的相互作用能先急剧增加,当 $\lambda_0 = 0.75 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ 时,相互作用能达到极大值 ($H_{\text{int max}} = -58.06 \text{ meV}$),然后随

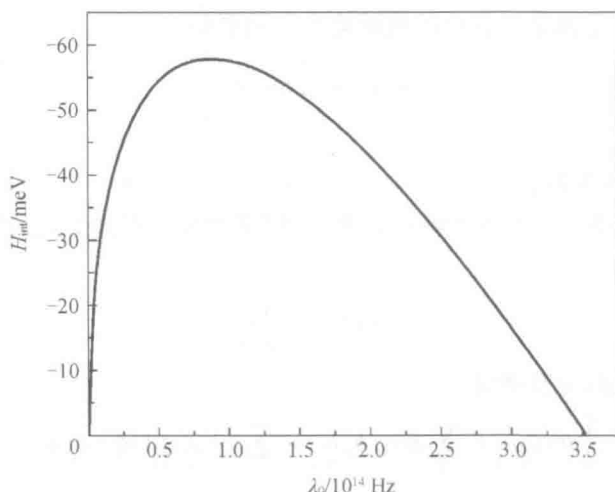
振动频率的增加急剧减小。把方程(1.13)代入方程(1.21)得到 $H_{\text{int}} = \hbar\lambda_0 - \frac{3}{2}\alpha\hbar\sqrt{\frac{\omega_{\text{LO}}}{\pi}}\lambda_0^{\frac{1}{2}} -$

$\frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m$,假定材料选定 α_R 不变,则 $\frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m$ 项为常数, λ_0 增加的速度大于 $\lambda_0^{\frac{1}{2}}$,但系数 $\hbar$ 小于

$\frac{3}{2}a\hbar\sqrt{\frac{\omega_{\text{LO}}}{\pi}}$,所以会出现峰值。把 $\lambda_0 = 0.75 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ (相互作用能达到极大值时)代入方程

(1.13)会得到 ω_0 ,极化子的半径 $r_0 = (\frac{\hbar}{2m\omega_{\text{LO}}})^{\frac{1}{2}}$,量子点的有效受限长度 $l_0 = (\frac{\hbar}{m\omega_0})^{\frac{1}{2}}$,我们

发现 $r_0 \approx l_0 = 1.3 \text{ nm}$ 。也就是说当极化子的半径 r_0 等于量子点的有效受限长度 l_0 时,相互作用能达到最大。由图 1.2 我们知道极化子的振动频率 λ_0 和受限强度 ω_0 成正比关系。由此可得出极化子的相互作用能随受限强度的变化表现出共振的特性,合适的限定势(ω_0)有利于量子点中极化子的稳定。

图 1.4 RbCl 晶体中相互作用能 H_{int} 与振动频率 λ_0 的关系

1.2.3 结论

本节中,考虑 Rashba 效应的情况下,采用改进的线性组合算符和幺正变换的方法对量子点中强耦合极化子的基态能量进行研究,选用 RbCl 材料进行数值计算。

研究发现,Rashba 自旋-轨道相互作用使极化子的有效质量、基态能分裂为上下两支;量子点振动频率随受限强度的增加而增加;极化子的相互作用能随振动频率的增加先急剧增加,当达到极值后,随振动频率的增加而急剧减少。由于声子对总能量贡献为负,所以极化子自旋分裂态比裸电子更稳定,由此可见 Rashba 效应对了解半导体量子点中强耦合极化子的性质起了非常重要的作用。

1.3 Rashba 效应影响下半导体量子点中弱耦合束缚极化子的性质

在本节中,从电子-声子相互作用的哈密顿量出发,研究了 Rashba 效应影响下半导体量子点中弱耦合束缚极化子的性质,并对 GaAs 量子点进行了数值计算从而得到了一些理论结果。

1.3.1 理论与模型

假设电子被束缚于氢化杂质中并与离子晶体或极性半导体的体纵光学声子场相互作用,且使电子在一个方向(设 z 方向)比另外两个方向受限强得多,所以只考虑电子在 xoy 平

面上运动。设单一半导体量子点中的束缚势为抛物形势

$$V(\rho) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \rho^2 \quad (1.22)$$

式中 m ——带质量;

ρ ——二维坐标矢量;

ω_0 ——量子点在 xoy 平面的特征频率,并定义为量子点的受限强度。

库仑束缚势为

$$V(r) = -\frac{e^2}{\varepsilon_\infty r} \quad (1.23)$$

电子-声子体系的哈密顿量为

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \rho^2 + \sum_q \hbar \omega_{LO} b_q^\dagger b_q + \sum_q [V_q \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) b_q + \text{h. c.}] - \frac{e^2}{\varepsilon_\infty r} + \frac{\alpha_R}{\hbar} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) \quad (1.24)$$

式中 $b^+ (b)$ ——波矢为 $\mathbf{q} (\mathbf{q} = q_{//}, q_\perp)$ 的体纵光学声子的产生(湮灭)算符。

$\mathbf{r} = (\rho, z)$ 为电子坐标矢量,且

$$V_q = i \frac{\hbar \omega_s}{q} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.25)$$

$$\alpha = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}} \right) \left(\frac{2m\omega_{LO}}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \quad (1.26)$$

式中 $\varepsilon_\infty, \varepsilon_0$ ——高频和静介电常数;

$\frac{\alpha_R}{\hbar} (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x)$ ——Rashba 效应影响下单电子的哈密顿量,其中 σ_x, σ_y 是泡利自旋算符。

α_R 为 Rashba 自旋轨道耦合常数,其与电场的期待值 $\langle E \rangle$ 呈线性关系,在半导体材料中与许多结构因素有关,例如几何结构。 $\alpha_R = c \langle E \rangle$, 系数 c 与带宽和有效质量成反比。在量子点异质结构中, Rashba 效应通常占主导地位,我们选择 Rashba 项忽略 Dresselhaus 项。

将库仑束缚势作级数展开

$$\frac{1}{r} = \frac{4\pi}{v} \sum_q \frac{1}{q^2} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.27)$$

对电子在 xoy 平面运动的动量和坐标引进线性组合算符

$$P_j = \left(\frac{m\hbar\lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (a_j + a_j^\dagger + P_{0j}) \quad (1.28a)$$

$$\rho_j = i \left(\frac{\hbar}{2m\lambda} \right)^{\frac{1}{2}} (a_j - a_j^\dagger), \quad j = x, y \quad (1.28b)$$

$$[a_j, a_j^+] = \delta_{ij} \quad (1.28c)$$

进行两次么正变换

$$U_1 = \exp(-i \sum_q \hbar q \cdot r b_q^+ b_q) \quad (1.29a)$$

$$U_2 = \exp(\sum_q (b_q^+ f_q - b_q f_q^*)) \quad (1.29b)$$

则哈密顿量变为

$$H' = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 = H'_{//} + \frac{p_z^2}{2m} \quad (1.30)$$

令基态波函数为

$$|\Psi\rangle = |\varphi(Z)\rangle (a \chi_{\frac{1}{2}} + b \chi_{-\frac{1}{2}}) |0\rangle_b |0\rangle_a \quad (1.31)$$

式中 $|\varphi(Z)\rangle$ ——电子 z 方向的波函数 $|\langle \varphi(Z) | \varphi(Z) \rangle|^2 = \delta(Z)$;

$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $\chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ——自旋向上、向下态, a, b 为常数;

$|0\rangle_a$ ——极化子的基态;

$|0\rangle_b$ ——零声子态, 由 $b_q |0\rangle_b = a_j |0\rangle_a = 0$ 确定。

系统在 xoy 平面的总动量为

$$\mathbf{P}_{//T} = \mathbf{P}_{//} + \sum_q b_q^+ b_q \hbar \mathbf{q}_{//} \quad (1.32)$$

计算 $U_2^{-1} U_1^{-1} (H'_{//} - \mathbf{P}_{//T} \cdot \mathbf{u}) U_1 U_2$ 对态 $|0\rangle_b |0\rangle_a$ 的平均值, 其中 u 为拉格朗日乘子。对 $|\psi\rangle$ 的久期值为 $F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q) = \langle \psi | (H'_{//} - \mathbf{P}_{//T} \cdot \mathbf{u}) | \psi \rangle$, $F(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q)$ 对 λ, f_q 的变分极值给出量子点中弱耦合束缚极化子的基态能量上限 $E_{0\pm}$, 即

$$E_{0\pm} = \min [F_{\pm}(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q)] \quad (1.33)$$

$$F_{\pm}(\mathbf{u}, \mathbf{P}_0, \lambda, f_q) = {}_a \langle 0 | {}_b \langle 0 | U^{-1} (H_{//} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{u}) U | 0 \rangle_b | 0 \rangle_a \frac{\hbar \lambda}{2} + \frac{\hbar \omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar \lambda}{4} P_0^2 -$$

$$\left(\frac{m \hbar \lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_0 + \sum_q \{ V_q f_q \exp(i q_z z) \cdot \exp(-\frac{\hbar q^2}{4\lambda m}) + \text{h. c.} \} -$$

$$\frac{4\pi e^2}{v \varepsilon_{\infty}} \sum_q \frac{1}{q^2} \exp(-\frac{\hbar q^2}{4m\lambda}) + \sum_q [\hbar \omega_{LO} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}] \cdot |f_q|^2 -$$

$$\left(\frac{\hbar \lambda}{2m} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_q |f_q|^2 \hbar q_j \cdot P_0 \pm \frac{\alpha_R}{\hbar} \left(\frac{m \hbar \lambda}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (P_{0x} + P_{0y}) \quad (1.34)$$

上式对 $f_q (f_q^*)$ 变分得

$$f_q = - \frac{v_q^* \exp(-i q_z z)}{\hbar \omega_{LO} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \left(\frac{\hbar \lambda}{2m} \right)^{\frac{1}{2}} \hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{P}_0} \quad (1.35)$$

令 $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$ 表示量子点有效受限长度, 以及 $\beta = \frac{e^2}{\varepsilon_\infty} \sqrt{\frac{m}{\pi\hbar}}$ 表示库仑束缚势。将式 (1.35) 代入式 (1.34) 求和变积分, 对 P_0 求变分, 再代入式 (1.34) 得

$$F_{\pm}(u, \lambda) = \frac{\hbar\lambda}{2} - \alpha\hbar\omega_{LO} - 2\beta\sqrt{\lambda} + \frac{\hbar^3}{2m^2l_0^4\lambda} - \frac{\frac{1}{2}mu^2}{1 - \frac{\alpha}{6}} \pm \frac{\alpha_R}{\hbar}mu - \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m \quad (1.36)$$

$F_{\pm}$ 对 λ 的变分, $\frac{\partial H_{int}}{\partial \lambda} = 0$, 可得到量子点中弱耦合束缚极化子振动频率满足的方程

$$\lambda^2 - \frac{2\beta}{\hbar}\lambda^{\frac{3}{2}} - \frac{\hbar^2}{m^2l_0^4} = 0 \quad (1.37)$$

解为

$$\lambda = \lambda_0 \quad (1.38)$$

量子点中弱耦合束缚极化子的基态分裂能表示为

$$E_{0\pm} = \frac{\hbar\lambda_0}{2} - \alpha\hbar\omega_{LO} - 2\beta\sqrt{\lambda_0} + \frac{\hbar^3}{2m^2l_0^4\lambda_0} - \frac{\frac{1}{2}mu^2}{1 - \frac{\alpha}{6}} \pm \frac{\alpha_R}{\hbar}mu - \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m \quad (1.39)$$

零磁场下自旋分裂能表示为

$$E_{so} = \pm \frac{\alpha_R}{\hbar}mu - \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m \quad (1.40)$$

量子点中弱耦合束缚极化子的动量期待值

$$\bar{P}_{//} = {}_b\langle 0 | {}_a\langle 0 | U^{-1} P_{//T} U | 0 \rangle_a | 0 \rangle_b = m \left(\frac{1}{1 - \frac{\alpha}{6}} \pm \frac{2\alpha_R}{\hbar u} \right) u \quad (1.41)$$

有效质量为

$$m_{\pm}^* = m \left(\frac{1}{1 - \frac{\alpha}{6}} \pm \frac{2\alpha_R}{\hbar u} \right) \quad (1.42)$$

式中 u ——慢电子速度。

量子点中弱耦合束缚极化子的有效哈密顿量可表示为

$$H_{eff} = H_{kin} + H_{int} \quad (1.43)$$

$$H_{kin} = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{P_{//}^2}{2m^*} \quad (1.44)$$

$$H_{int} = \frac{\hbar\lambda_0}{2} - \alpha\hbar\omega_{LO} - 2\beta\sqrt{\lambda_0} + \frac{\hbar^3}{2m^2l_0^4\lambda_0} - \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2}m \quad (1.45)$$