低维纳米结构中的
极化子和量子比特

DIWEI NAMI JIEGOU ZHONG DE JIHUAZI HE LIANGZI BITE

赵翠兰◎著

哈爾濱工程大學出版社
Harbin Engineering University Press

低维纳米结构中的极化子和量子比特

赵翠兰　著

哈爾濱工程大学出版社
Harbin Engineering University Press

内容简介

本书分四章，重点介绍柱型量子点内极化子的性质、量子环中极化子的性质和量子比特的性质、有限深势阱中极化子和量子比特的性质、耦合的球型量子点内极化子的基态和激发态性质。

本书是著者和课题组多年研究成果的部分总结，可用作有关专业研究人员或研究生的参考书。书中部分研究内容得到国家自然科学基金资助（项目编号：11464034；10964005）。

图书在版编目（CIP）数据

低维纳米结构中的极化子和量子比特/赵翠兰著.—哈尔滨：哈尔滨工程大学出版社，2018.12
ISBN 978-7-5661-2154-7

Ⅰ.①低… Ⅱ.①赵… Ⅲ.①纳米材料-磁极化子-研究 Ⅳ.①TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2018）第 270954 号

选题策划 王洪菲
责任编辑 张忠远
封面设计 李海波

出版发行 哈尔滨工程大学出版社
社　　址 哈尔滨市南岗区东大直街 124 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 787 mm×960 mm 1/16
印　　张 7.25
字　　数 161 千字
版　　次 2018 年 12 月第 1 版
印　　次 2018 年 12 月第 1 次印刷
定　　价 38.00 元
http://www.hrbeupress.com
E-mail:heupress@hrbeu.edu.cn

前　言

半导体物理学作为凝聚态物理学的一个分支,已经蓬勃发展了半个多世纪,并成为一个庞大的、发展迅速的学科。半导体材料和器件是 20 世纪人类最重要的发现之一,也是科学研究最主要的领域之一。

根据人的意志和需要,调制半导体晶格周期结构、创造出人工晶体、实现特定的物理特性是半导体材料研究领域的一项重大突破。20 世纪 80 年代以来,半导体材料中低维纳米结构系统应运而生,由于其丰富的物理内涵和巨大的应用前景,迅速成为凝聚态物理、材料科学、生物化学及信息科学等领域关注的焦点。针对低维纳米结构,人们开展了一系列的理论、实验和应用研究。低维纳米结构中,晶格振动在电荷载流子动力学中起着重要作用,因此有必要研究低维纳米结构中的声子效应。电子和声子相互作用系统称为极化子。

本书共四章,分别介绍我们的理论研究情况。第 1 章为柱型量子点内极化子的性质,主要介绍如何应用线性组合算符、幺正变换和变分相结合的方法,研究柱型量子点中极化子的基态和磁极化子的基态、激发态及重整化质量的性质。第 2 章为量子环中极化子的性质,主要介绍如何利用解析求解量子环中电子的能量本征方程、对体系哈密顿量进行幺正变换和变分相结合的方法,研究量子环中电子的能态和量子比特的性质、无磁场和存在磁场时量子环中极化子的性质、温度量子环中极化子性质的影响及声子对量子环中量子比特性质的影响。第 3 章为有限深势阱中极化子的性质,主要介绍如何应用平面波展开、幺正变换和变分相结合的方法,研究有限深势阱里量子盘中极化子和量子比特的性质、极化子的温度效应和磁极化子的性质、球型量子点中极化子和量子比特的性质。第 4 章为耦合量子点内极化子的性质,主要介绍如何应用求解能量本征方程、幺正变换和变分相结合的方法研究两个耦合的球型量子点内极化子的基态和激发态性质。

本书是著者和课题组多年研究成果的部分总结,可用作有关专业研究人员或研究生的参考书。书中部分研究内容得到国家自然科学基金资助(项目编号:11464034,10964005)。本书的出版得到了内蒙古民族大学凝聚态物理重点学科、内蒙古民族大学专业建设经费的支持,在此表示感谢!

受著者水平所限,书中难免有不妥之处,望读者指正。

著　者

2018 年 10 月

目　　录

第 1 章　柱型量子点内极化子的性质

半导体低维结构材料的特性研究方面，不论是半导体物理的基础问题研究，还是新型光电器件应用研究都有极其重要的意义和价值。随着分子束外延(MBE)技术、金属有机化合物气相沉积(MOCVD)技术等的发展，纳米材料已经成为材料科学和凝聚态物理研究的前沿热点。理论分析表明，当半导体材料从体相逐渐减小至一定临界尺度后，即当材料的特征尺寸在三个维度上都与电子的德布罗意波长或电子的平均自由程可比拟或更小时，电子在材料中的运动受到了较强限制，使电子的能量量子化，这种电子在三个维度上都受限制的结构叫作三维受限纳米结构。

纳米材料由于尺度减小，具有了一系列新的重要性质。如量子尺寸效应、量子干涉效应、量子隧穿效应、库仑阻塞效应、表面效应等，这一切为新材料的开发、利用带来了无限生机和希望。特别是量子点，由于三维受限，其量子效应更加明显，在量子器件设计和应用中必将带来巨大的经济效益和社会效益，因此，许多学者对其进行了研究。

如一些专家学者在有效质量近似下，采用微扰法[1]、变分法[2-3]、少体法和 Landau - Pekar 变分法[4]研究盘型量子点中强耦合极化子的性质，表明极化子基态、激发态的束缚能和电子周围的光学声子平均数均随磁场和量子点的受限强度而变化。陈庆虎等[5]用路径积分方法，研究抛物量子点中束缚极化子的性质，表明电子 - 声子之间的耦合强度、库仑结合参量和受限势强度等对极化子的性质均有影响。Fliyou 等[6]用变分法和改进的 LLP 幺正变换方法，研究球型量子点中在中心的类氢杂质束缚能，表明体纵光学(LO)声子比表面光学(SO)声子作用大得多。肖景林等[7]利用线性组合算符方法，研究抛物量子点中强合极化子的性质，表明强耦合极化子的基态能量、束缚能量均随有效束缚强度的增大而减小。

朱嘉麟等[8-9]采用少体法，对球型量子点进行研究，结果表明施主态的结合能与量子点的形状、大小、维数、限制势等均有关，且他们关于磁场诱导量子阱中不对称 D 态分解的理论预言，已经被 Mccombe 研究小组所证实[10]。Charrour 等[11]用修正的 LLP 变分方法，研究磁场中柱型量子点内类氢杂质的结合能，表明杂质在量子点中的位置、磁场强度及量子点半径对结合能影响较大。朱等[5]用微扰法，研究磁场下抛物量子点中磁极化子的回旋共振质量，发现强磁场下，抛物量子点中磁极化子的回旋共振质量劈裂成两个回旋共振质量。朱等[4]用 Landau - pekar 变分法，研究磁场中抛物量子点内强耦合极化子的性质，得出极化子束缚能、平均声子数与外场有关。Wendler 等[12]用二级微扰法，研究磁场中量子点内电子的相互作用，得到 Landau 能级的极化修正和极化子的回旋质量随维数减少而增加的结论。

周等[13-15]用 Landau - pekar 变分法,讨论了盘型量子点中强耦合极化子的性质,表明磁极化子基态、激发态的束缚能、共振频率与受限强度、外磁场强度有关。

Lee 等[16]也研究了强磁场中抛物量子点内与声子相互作用系统的低能态性质,数值计算表明在基态伴随有轨道角动量和自旋角动量的跃迁,这一点与无电子 - LO 声子相互作用时一样。MuKhopadhyay 等[3]用 LLP 幺正变换方法讨论了电子 - LO 声子间耦合常数取任意值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。Kandemir 等[17]通过引进一个试探波函数,确定了极化效应对外磁场中束缚于类氢杂质的一个电子的低能态的影响,结果表明电子 - LO 声子间的相互作用、磁场、量子点受限情况对杂质结合能及共振质量均有影响。肖景林等[18-19]使用线性组合算符与幺正变换相结合的方法,研究了量子点中极化子、磁极化子的基态性质。

Peter 等[20]观察了单个 GaAs 量子点中声子边带对激子和压电激子的影响,指出压电激子中声子边带对激发谱线的影响较激子中大。Wang 等[21]研究了 ZnO 纳米线中电子 - 声子耦合的尺度依赖性,表明随着纳米线直径的减小, 由一阶与二阶 Raman 散射截面之比决定的电子 - 体 LO 声子耦合强度消失。Chen 等[22]通过将哈密顿量对角化研究了 GaAs 量子点中电子 - 声学声子散射导致的自旋 - 弛豫现象。

量子点(QDs)是一种典型的三维受限纳米结构。我们对量子点中极化子的性质进行了一系列研究。本章主要介绍如何应用线性组合算符、幺正变换和变分相结合的方法,研究柱型量子点中极化子的基态和磁极化子的基态、激发态及重整化质量的性质。

1.1 柱型量子点中弱耦合极化子的性质

设电子被限制在半径为 r_0、高为 L 的柱型量子点内。建立直角坐标系 $o-xyz$,且 oz 轴在柱的中心轴线上,xoy 平面与柱的中心轴线垂直,并通过柱的中点。设电子在 z 方向被限制在无限深的势阱里,在 xoy 平面内被抛物势限制,则电子 - LO 声子相互作用的哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \sum_q \hbar\omega_q b_q^+ b_q + \frac{1}{2}m^*\omega_0^2\rho^2 + V(z) + \sum_q [V_q^* b_q^+ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\cdot r} + h.c.] \tag{1.1}$$

其中

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| \leqslant \dfrac{L}{2} \\ \infty & |z| > \dfrac{L}{2} \end{cases} \tag{1.2}$$

$$V_q = \mathrm{i}\left(\frac{\hbar\omega_{\mathrm{LO}}}{q}\right)\left(\frac{\hbar}{2m^*\omega_{\mathrm{LO}}}\right)^{1/4}\left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \tag{1.3}$$

$$\alpha = \left(\frac{\mathrm{e}^2}{2\hbar\omega_{\mathrm{LO}}}\right)\left(\frac{2m^*\omega_{\mathrm{LO}}}{\hbar}\right)^{1/2}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon_0}\right)^{1/2} \tag{1.4}$$

式中　m^*——裸带质量；

$\boldsymbol{\rho}$——xoy 平面内的二维坐标矢量；

ω_0——量子点在 xoy 平面的特征频率；

$b_{\boldsymbol{q}}^+(b_{\boldsymbol{q}})$——波矢为 $\boldsymbol{q}$ 的 LO 声子的产生(湮灭) 算符；

$\boldsymbol{r}$——电子坐标，$\boldsymbol{r}=(\boldsymbol{\rho},z)$；

L——量子点的柱高。

进行两次幺正变换

$$\left.\begin{aligned} U_1 &= \exp\left(-\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{q}}\hbar\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}b_{\boldsymbol{q}}^+b_{\boldsymbol{q}}\right)\\ U_2 &= \exp\left[\sum_{\boldsymbol{q}}(f_{\boldsymbol{q}}b_{\boldsymbol{q}}^+ - f_{\boldsymbol{q}}^*b_{\boldsymbol{q}})\right]\end{aligned}\right\} \tag{1.5}$$

式中　$f_{\boldsymbol{q}}$——变分参量函数。

对 xoy 平面内电子的运动引进线性组合算符

$$\left.\begin{aligned} p_j &= \left(\frac{m^*\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2}(a_j + a_j^+)\\ \rho_j &= \mathrm{i}\left(\frac{\hbar}{2m^*\lambda}\right)(a_j - a_j^+),\quad j=x,y\end{aligned}\right\} \tag{1.6}$$

式中　λ——变分参量，得到

$$H = H_0 + H' \tag{1.7}$$

其中

$$\begin{aligned} H_0 = {} & \frac{p_z^2}{2m^*} - \frac{\hbar}{m^*}\sum_{\boldsymbol{q}} p_z q_z(f_{\boldsymbol{q}}^* + b_{\boldsymbol{q}}^+)(f_{\boldsymbol{q}} + b_{\boldsymbol{q}}) + \frac{\hbar\lambda}{4}\sum_j(2a_j^+a_j + a_ja_j + a_j^+a_j^+ + 1) + {}\\ & \frac{\hbar\omega_0^2}{4\lambda}\sum_j(2a_j^+a_j + 1 - a_j^+a_j^+ - a_ja_j) + \sum_q\left(\frac{\hbar^2q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\mathrm{LO}}\right)(f_{\boldsymbol{q}}^* + b_{\boldsymbol{q}}^+)(f_{\boldsymbol{q}} + b_{\boldsymbol{q}}) + {}\\ & \sum_{\boldsymbol{q}}[V_{\boldsymbol{q}}^*(b_{\boldsymbol{q}}^+ + f_{\boldsymbol{q}}^*) + h.c.] - \frac{\hbar}{m^*}\sum_{\boldsymbol{q},j}\left(\frac{m^*\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2}q_j(a_j - a_j^+)(f_{\boldsymbol{q}}^* + b_{\boldsymbol{q}}^+)(f_{\boldsymbol{q}} + b_{\boldsymbol{q}})\end{aligned} \tag{1.8}$$

H'是不同波矢的声子之间的相互作用能量，将其忽略。

选取基态尝试波函数为 $|\Psi\rangle = |\varphi_0(z)\rangle|0_q\rangle|0_j\rangle$，其中 $||\varphi_0(z)\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)$是电子

z 方向波函数，$|0_q\rangle$ 是零声子态，$|0_j\rangle$ 是极化子基态。则式(1.8)对 $|\Psi\rangle$ 的期待值为

$$F = \langle \Psi|H_0|\Psi\rangle = \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 + \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \sum_q \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\mathrm{LO}}\right)|f_q|^2 + \sum_q [V_q^* f_q^* + h.c.] \tag{1.9}$$

式(1.9)对 f_q^* 取变分，得

$$f_q = -\frac{V_q^*}{\dfrac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\mathrm{LO}}} \tag{1.10}$$

式(1.9)对 λ 取变分，得

$$\lambda = \omega_0 \tag{1.11}$$

将式(1.10)、式(1.11)代入式(1.9)，并将求和化为积分，得极化子基态能量为

$$E_0 = -\alpha\hbar\omega_{\mathrm{LO}} + \hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 = -\alpha\hbar\omega_{\mathrm{LO}} + \frac{\hbar^2}{m^* l_0^2} + \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \tag{1.12}$$

式中　l_0——有效受限长度，$l_0 = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m^*\omega_0}}$。

以 $\hbar\omega_{\mathrm{LO}}$ 为能量单位，则极化子基态能量为

$$E_0 = -\alpha + \frac{\hbar}{m^*\omega_{\mathrm{LO}}}\left[\frac{1}{l_0^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\right] \tag{1.13}$$

由公式(1.13)可知，极化子基态能量 E_0 与耦合强度 α、有效受限长度 l_0 和柱高 L 有关系。由式(1.13)可见，耦合强度增大，α 增大，基态能量降低，这源于电子－声子相互作用能量是负值。选取 ZnS、AgBr 量子点进行数值计算可知[23]，当耦合常数、柱高给定时，极化子基态能量随有效受限长度的减小而增加，有效受限长度越小，增加越快。当有效受限长度减小到某一值($\alpha=0.649, L=20.0$ nm, $l_0=7.2$ nm)时，极化子能量由负变为正；当有效受限长度趋于无穷大时，极化子基态能量趋于极限值。当耦合常数和有效受限长度给定时，极化子基态能量随柱高的减小而增大，柱高越小，增加越快；当柱高减小到某一值($\alpha=0.649, L=10.0$ nm, $l_0=20$ nm)时，极化子能量也由负变为正。

1.2　柱型量子点中弱耦合磁极化子的性质

理论模型与1.1节中弱耦合极化子相同，不同之处是沿 z 轴正方向增加外磁场 $B=(0,0,B)$，则电子－LO 声子相互作用的哈密顿量为

$$H = \frac{(p + e\boldsymbol{A}/c)^2}{2m^*} + \sum_q \hbar\omega_q b_q^+ b_q + \frac{1}{2}m^*\omega_0^2\rho^2 + V(z) + \sum_q [V_q^* b_q^+ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q\cdot r} + h.c.] \tag{1.14}$$

其中

$$V(z)=\begin{cases}0 & |z|\leqslant \dfrac{L}{2}\\ \infty & |z|>\dfrac{L}{2}\end{cases}$$

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

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

式中,$\boldsymbol{A}$ 为矢量势,其他各个物理量的含义与式(1.1)至式(1.4)相同。

进行两次幺正变换,得

$$\left.\begin{aligned}U_1&=\exp\left(-\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{q}}\hbar\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}b_{\boldsymbol{q}}^+b_{\boldsymbol{q}}\right)\\ U_2&=\exp\left[\sum_{\boldsymbol{q}}(f_{\boldsymbol{q}}b_{\boldsymbol{q}}^+-f_{\boldsymbol{q}}^*b_{\boldsymbol{q}})\right]\end{aligned}\right\}$$

式中,$f_{\boldsymbol{q}}$ 是变分参量函数,对 xoy 平面内电子的运动引进线性组合算符

$$\left.\begin{aligned}p_j&=\left(\frac{m^*\hbar\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a_j+a_j^+)\\ \rho_j&=\mathrm{i}\left(\frac{\hbar}{2m^*\lambda}\right)(a_j-a_j^+),\quad j=x,y\end{aligned}\right\}$$

其中 λ 是变分参量。得到

$$H=H_0+H'$$

其中

$$\begin{aligned}H_0=&\frac{p_z^2}{2m^*}-\frac{\hbar}{m^*}\sum_{\boldsymbol{q}}p_zq_z(f_{\boldsymbol{q}}^*+b_{\boldsymbol{q}}^+)(f_{\boldsymbol{q}}+b_{\boldsymbol{q}})+\frac{\hbar\lambda}{4}\sum_j(2a_j^+a_j+a_ja_j+a_j^+a_j^++1)+\\&\sum_q\left(\frac{\hbar^2q^2}{2m^*}+\hbar\omega_{\mathrm{LO}}\right)(f_{\boldsymbol{q}}^*+b_{\boldsymbol{q}}^+)(f_{\boldsymbol{q}}+b_{\boldsymbol{q}})+\sum_{\boldsymbol{q}}[V_{\boldsymbol{q}}^*(b_{\boldsymbol{q}}^++f_{\boldsymbol{q}}^*)+h.c.]-\\&\frac{\hbar}{m^*}\sum_{q,j}\left(\frac{m^*\hbar\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}}q_j(a_j-a_j^+)(f_q^*+b_q^+)(f_q+b_q)+\frac{\mathrm{ie}B}{2m^*}[(a_y^++a_y)-(a_x^++a_x)]+\\&\frac{\mathrm{ie}B}{2m^*}\left(\frac{\hbar}{2m^*\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_q\hbar(f_q^*+b_q^+)(f_q+b_q)[q_x(a_y-a_y^+)-q_y(a_x-a_x^+)]+\\&\left(\frac{\hbar e^2B^2}{16m^*}+\frac{\hbar\omega_0^2}{4\lambda}\right)\sum_j(2a_j^+a_j+\delta_{jj}-a_j^+a_j^+-a_ja_j)\end{aligned}\tag{1.15}$$

H'是不同波矢的声子之间的相互作用能量,将其忽略。

选取基态尝试波函数为$|\Psi\rangle = |\varphi_0(z)\rangle|0_q\rangle|0_j\rangle$，其中$|\varphi_0(z)\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right)$是电子$z$方向波函数，$|0_q\rangle$是零声子态，$|0_j\rangle$是极化子基态。则式(1.21)对$|\Psi\rangle$的期待值为

$$F = \langle\Psi|H_0|\Psi\rangle$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 + \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar\omega_c^2}{8\lambda} + \sum_q\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\mathrm{LO}}\right)|f_q|^2 + \sum_q\left(V_q^* f_q^* + h.c.\right) \tag{1.16}$$

式(1.16)对f_q^*取变分，得

$$f_q = -\frac{V_q^*}{\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\mathrm{LO}}}$$

式(1.16)对λ取变分，得

$$\lambda = \frac{1}{2}\sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2} \tag{1.17}$$

将式(1.17)、式(1.18)代入式(1.16)，并将求和化为积分，得磁极化子基态能量为

$$E_0 = -\alpha\hbar\omega_{\mathrm{LO}} + \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 + \frac{\hbar}{2}(\omega_c^2 + 4\omega_0^2)^{\frac{1}{2}} \tag{1.18}$$

由公式(1.18)可知，磁极化子基态能量E_0与耦合常数α、特征频率ω_0、回旋共振频率ω_c和柱高L有关。由式(1.18)可见，耦合强度增大，α增大，基态能量降低，这源于电子－声子相互作用能量是负值。选取ZnS量子点进行数值计算可知[24]，当耦合常数、回旋共振频率、柱高给定时，磁极化子基态能量随特征频率的增加而增加，这是由于特征频率增加时，电子在平行于xoy平面内的振动能量也增加；当耦合常数、特征频率、柱高给定时，磁极化子基态能量随回旋共振频率的增加而增加，这是由于外磁场强度增加时，电子在外磁场中的附加能量也增加。当特征频率（或回旋共振频率）增加到某一值时，例：对于柱高为$L=20$ nm、回旋共振频率$\omega_c = 0.5\omega_{\mathrm{LO}}$的情况，特征频率$\omega_0 = 0.27\omega_{\mathrm{LO}}$时（或对于柱高为20 nm、$\omega_c = 0.27\omega_{\mathrm{LO}}$的情况，$\omega_0 = 0.5\omega_{\mathrm{LO}}$时），磁极化子基态能量由负变为正。当耦合常数、特征频率和回旋共振频率给定时，磁极化子基态能量随柱高的减小而增加，柱高越小，增加越快；当柱高减小到某一值时，例：对于$\omega_c = \omega_0 = 0.5\omega_{\mathrm{LO}}$的情况，柱高$L = 33.1$ nm时，磁极化子能量也由负变为正。总之，抛物势作用下的柱型量子点中的束缚磁极化子，其基态能量与量子点的尺度、外磁场、特征频率等有关。

1.3　柱型量子点中弱耦合磁极化子的激发态性质

理论模型与1.2节中的磁极化子相同,则电子-LO声子相互作用的哈密顿量也相同。重复式(1.14)至式(1.15)的推导过程,得到式(1.15)。同样,H'是不同波矢的声子之间的相互作用能量,将其忽略。

选取尝试波函数为$|\Psi\rangle = |\varphi(z)\rangle |n_q\rangle |n_j\rangle$,其中$|\varphi(z)\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{l\pi z}{L}\right)(l = 1,3,5,\cdots)$是电子$z$方向电子波函数,$|n_q\rangle$是声子态,$|n_j\rangle$是极化子态。则式(1.21)对$|\Psi\rangle$的期待值为

$$\begin{aligned}F &= \langle \Psi|H_0|\Psi\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar\omega_c^2}{8\lambda}\right)\left(1 + \sum_j n_j\right) + \sum_q \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\mathrm{LO}}\right)(|f_q|^2 + n_q) + \\ &\quad \sum_q (V_q^* f_q^* + h.c.)\end{aligned} \tag{1.19}$$

当系统处于基态时,$l=1,n_q=0,n_j=0$,代入式(1.19),分别对f_q^*和λ取变分,得到式(1.10)的变分参量f_q和式(1.17)的变分参量λ,再将式(1.17)、式(1.18)代入式(1.20),并将求和化为积分,得磁极化子基态能量(以$\hbar\omega_{\mathrm{LO}}$为单位)为

$$E_0 = -\alpha + \frac{\hbar}{2m^*\omega_{\mathrm{LO}}}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 + \frac{\hbar}{2}\left(\frac{\omega_c^2}{\omega_{\mathrm{LO}}} + 4\frac{\omega_0^2}{\omega_{\mathrm{LO}}}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1.20}$$

将式(1.10)、式(1.17)代入式(1.19),得到激发态$|\Psi_{i_{zex}}\rangle = |\varphi(z)\rangle|0_q\rangle|0_j\rangle(l\neq1)$和激发态$|\Psi_{n_jex}\rangle = |\varphi(z)\rangle|0_q\rangle|n_j\rangle$上磁极化子的能量分别为

$$E_{lz} = \langle\Psi_{lzex}|H_0|\Psi_{lzex}\rangle = -\alpha + \frac{\hbar}{2m^*\omega_{\mathrm{LO}}}\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2 + \frac{\hbar}{2}\left(\frac{\omega_c^2}{\omega_{\mathrm{LO}}} + 4\frac{\omega_0^2}{\omega_{\mathrm{LO}}}\right)^{1/2} \tag{1.21}$$

$$E_{n_j} = \langle\Psi_{n_j}|H_0|\Psi_{n_j}\rangle = -\alpha + \frac{\hbar}{2m^*\omega_{\mathrm{LO}}}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 + \frac{\hbar}{2}\left(\frac{\omega_c^2}{\omega_{\mathrm{LO}}} + 4\frac{\omega_0^2}{\omega_{\mathrm{LO}}}\right)^{1/2}(1+2n) \tag{1.22}$$

式(1.22)已经考虑了电子在xoy平面内运动的对称性,认为平均说来,$n_x = n_y = n$。由基态到各个激发态的激发能分别为

$$\Delta E_{lz} = \frac{\hbar(l^2-1)}{2m^*\omega_{\mathrm{LO}}}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \tag{1.23}$$

$$\Delta E_{n0} = n\hbar\left(\frac{\omega_c^2 + 4\omega_0^2}{\omega_{\mathrm{LO}}}\right) \tag{1.24}$$

由式(1.20)至式(1.22)可知磁极化子基态能量E_0、激发态能量E_{lz}和E_{n_j}与耦合强度α、

特征频率 ω_0、回旋共振频率 ω_c 和柱高 L 有关系。由上述三个式子可以看出，基态能量 E_0、激发态能量 E_{lz}、E_{n_j} 均随耦合强度 α 的增大而减小，原因是电子 - 声子相互作用能为负值。选取 AgBr 量子点作数值计算可知[25]，当耦合常数、回旋共振频率、柱高给定时，基态能量和激发态能量均随特征频率的增加而增加，这是由于特征频率增加时，电子在平行于 xoy 平面内的受限增强，使极化子的能量增加；当耦合常数、特征频率、柱高给定时，基态能量和激发态能量均随回旋共振频率的增加而增加，这是由于外磁场强度增加时，电子在磁场中受力增大，电子与外磁场之间的相互作用增强，导致电子与外磁场中的相互作用能量增加所致；当耦合常数、特征频率和回旋共振频率给定时，基态能量和激发态能量均随柱高的减小而增加，柱高愈小，增加愈快，当柱高减小到某一值时，不能形成束缚极化子，这是由于弱耦合下，电子与晶格振动之间的相互作用能量太小。由于量子点的高度越小特征频率越大，量子点的受限越强。所以，这也说明，不论极化子处于基态还是激发态，均会由于量子点的受限和磁场的增强而导致极化增强。

由式(1.23)可见，柱高愈大，能差愈小，当柱高趋于无穷大时，能差趋于零，量子尺寸效应消失。式(1.23)和式(1.24)也说明，量子点受限愈强(柱高越小，特征频率越大)，激发能越大。这是因为受限增强时，电子与晶格振动之间相互作用增强，进而能级劈裂。

由经典玻尔兹曼统计规律

$$n=\frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\lambda}{k_B T}\right)-1} \tag{1.25}$$

以及式(1.17)、式(1.22)也可以讨论磁极化子的温度效应。将(1.17)、式(1.22)和式(1.25)三式联立，可以获得激发态能量随温度变化的关系。根据参考文献[25]的数值计算结果可知，当柱高、特征频率和回旋共振频率给定时，激发态能量 E_n 随温度的升高而增加，这是由于温度升高时，电子的热运动动能增大，使得激发态上的极化子增多。并且，当温度高于某个值时，束缚极化子解体，激发态不存在。还得知，激发能在不同的磁场中随温度变化的规律相同，但磁场越强，能量越高。总之，柱型量子点中磁极化子的激发态、激发能均由于量子点的受限、磁场的增大及温度的升高而增大，即使量子点的极化加强。

1.4 柱型量子点中磁极化子的重整化质量

理论模型与 1.2 节中的磁极化子相同，则电子 – LO 声子相互作用的哈密顿量也相同。进行两次幺正变换

$$\left.\begin{aligned} U_1 &= \exp\left(-\mathrm{i}\sum_q \hbar q\cdot r b_q^+ b_q\right) \\ U_2 &= \exp\left[\sum_q (f_q b_q^+ - f_q^* b_q)\right] \end{aligned}\right\}$$

式中，f_q 是变分参量函数。对 xoy 平面内电子的运动引进线性组合算符

$$\left.\begin{aligned} p_j &= \left(\frac{m^*\hbar\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a_j + a_j^+ + p_{0j}) \\ \rho_j &= \mathrm{i}\left(\frac{\hbar}{2m^*\lambda}\right)(a_j - a_j^+),\quad j = x, y \end{aligned}\right\} \tag{1.26}$$

式中，λ、p_0 是变分参量。得到

$$H = H_0 + H'$$

其中

$$\begin{aligned} H_0 = {} & \frac{p_z^2}{2m^*} - \frac{\hbar}{m^*}\sum_q p_z q_z (f_q^* + b_q^+)(f_q + b_q) + \frac{\hbar\lambda}{4}\sum_j (2a_j^+ a_j + a_j a_j + a_j^+ a_j^+ + 1) + \\ & \frac{\hbar\lambda}{4}\sum_j (2a_j^+ p_{0j} + 2a_j p_{0j} + p_{0j}^2) + \sum_q \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} + \hbar\omega_{\mathrm{LO}}\right)(f_q^* + b_q^+)(f_q + b_q) + \\ & \sum_q [V_q^*(b_q^+ + f_q^*) + h.c.] - \frac{\hbar}{m^*}\sum_{q,j}\left(\frac{m^*\hbar\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}} q_j (a_j + a_j^+ + p_{0j})(f_q^* + b_q^+)(f_q + b_q) + \\ & \frac{\mathrm{i}eB}{2m^*}\left(\frac{\hbar}{2m^*\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\left[(a_y^+ + a_y + p_{0y})\left(\frac{2m^*\lambda}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} - \sum_q \hbar q_y (f_q^* + b_q^+)(f_q + b_q)\right]\cdot \\ & (a_x - a_x^+) + \frac{\mathrm{i}eB}{2m^*}\left(\frac{\hbar}{2m^*\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}\left[(a_x^+ + a_x + p_{0x})\left(\frac{2m^*\lambda}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} - \sum_q \hbar q_x (f_q^* + b_q^+)\cdot\right. \\ & \left.(f_q + b_q)\right](a_y - a_y^+) + \left(\frac{\hbar e^2 B^2}{16m^*\lambda} + \frac{\hbar\omega_0^2}{4\lambda}\right)\sum_j (2a_j^+ a_j + \delta_{jj} - a_j^+ a_j^+ - a_j a_j) \end{aligned} \tag{1.27}$$

H' 是不同波矢的声子之间的相互作用能量，将其忽略。

电子在 xoy 平面内的总动量为

$$\boldsymbol{p}_T = \boldsymbol{p}_{//} + \sum_q \hbar \boldsymbol{q}_{//} b_q^+ b_q \tag{1.28}$$

由于它是守恒量,则引进拉氏乘子 u,且对 $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{p}_T$ 按照式(1.5)进行两次幺正变换,得到

$$U_2^{-1}U_1^{-1}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{p}_TU_1U_2 = \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)\sum_j u_j(a_j^+ + a_j + p_{0j}) \tag{1.29}$$

选取尝试波函数为 $|\Psi\rangle = |\varphi(z)\rangle|n_q\rangle|n_j\rangle$,其中 $|\varphi(z)\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{l\pi z}{L}\right)(l=1,3,5,\cdots)$是电子 z 方向电子波函数,$|n_q\rangle$是声子态,$|n_j\rangle$是极化子态。则有

$$F = \langle\Psi|H_0 - U_2^{-1}U_1^{-1}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{p}_TU_1U_2|\Psi\rangle \tag{1.30}$$

对 F 进行变分运算,得磁极化子基态的有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = \frac{\hbar}{2m^*}\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\omega_0^2}{2\lambda} + \frac{\hbar\omega_c^2}{8\lambda}\right) - \frac{2\alpha}{L}(\hbar\omega_{\text{LO}})\left(\frac{\hbar}{2m^*\omega_{\text{LO}}}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot \sum_l \ln\left(1 + \frac{2m^*\omega_{\text{LO}}L^2}{\hbar\pi^2l^2}\right) + \frac{1}{2}Mu^2 \tag{1.31}$$

回旋共振频率为

$$\lambda = \frac{1}{2}\sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2} \tag{1.32}$$

基态能量为

$$E_0 = \frac{\hbar}{2m^*}\left(\frac{l\pi}{L}\right)^2 + \frac{1}{2}Mu^2 + \frac{\hbar}{2}(\omega_c^2 + 4\omega_0^2)^{\frac{1}{2}} - \frac{2\alpha}{L}(\hbar\omega_{\text{LO}})\left(\frac{\hbar}{2m^*\omega_{\text{LO}}}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot \sum_l \ln\left(1 + \frac{2m^*\omega_{\text{LO}}L^2}{\hbar\pi^2l^2}\right) \tag{1.33}$$

磁极化子的重整化质量为

$$M = m^*\frac{1}{1 - 4A(\alpha,L)} \tag{1.34}$$

其中

$$A(\alpha,L) = \frac{\alpha}{L}\left(\frac{\hbar}{2m^*\omega_{\text{LO}}}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{l=1,3,\cdots}\left[\frac{2m^*\omega_{\text{LO}}}{\hbar\left(1 + \frac{\hbar l^2\pi^2}{2m^*\omega_{\text{LO}}L^2}\right)^2} - \frac{7m^*\omega_{\text{LO}}}{\hbar\left(1 + \frac{\hbar l^2\pi^2}{2m^*\omega_{\text{LO}}L^2}\right)} - \frac{6m^*\omega_{\text{LO}}}{\hbar} - \frac{l^2\pi^2}{L^2}\ln\left(1 + \frac{2m^*\omega_{\text{LO}}L^2}{\hbar l^2\pi^2}\right)\right] \tag{1.35}$$

由式(1.32)、式(1.34)、式(1.35)可知,磁极化子的重整化质量与耦合强度 α、随特征频率 ω_0、回旋共振频率 ω_c 和柱高 L 有关系。由式(1.35)明显看出,重整化质量随耦合强度的增加而增加,这是由于电子与晶格振动之间的相互作用增强所致。选取 AgBr 量子点进行数值计算可知[26],重整化质量随量子点高度的增加而减小。而基态能量与量子点的尺

度、特征频率、耦合强度、磁场等均有关，当极化子运动速度不变时，基态能量随量子点柱高的增加而减小；随特征频率和磁场强度的增加而增加。

参考文献

[1] MUKHOPADHYAY S, CHATTERJEE A. Rayleigh-schroedinger perturbation theory for electron phonon interaction effects in polar semiconductor quantum dots with parabolic confinement[J]. Phys. Lett. A ,1995,204:411-417.

[2] LEPINE Y, BRUNEAU G. The effect of an anisotropic polaron in a parabolic quantum dot [J]. J. Phys: Condens. Matter,1998,10:1495-1503.

[3] MUKHOPADHYAY S, CHATTERJEE A. Relaxed and effective mass exited states of a quantum dot polaron[J]. Phys. Rev. B,1998,58:2088-2093.

[4] ZHU K D, GU S W. Magnetic field effects on strong-coupling polaron in quantum dot[J]. Phys. Lett. A ,1994,190:337-340.

[5] ZHU K D, GU S W. Cyclotrea resonance of magnetopolarons in a parabolic quantum dot [J]. Phys. Rev. B,Condens. Matter(USA),1993,47:12941-12945.

[6] FLIYOU M, SATORI H,BOUAYAD M. Polaronic effect on the ground-state energy of an electron bound to an impurity in spherical quantum dots[J]. Phys. Status Solidi B,1999, 212(5):97-103.

[7] XIAO L, WANG LI GUO. The properties of strong-coupling polaron in quantum dot[J]. J of Optoelectronics · Laser,2003,14(8):886-888.

[8] ZHU J L, XIONG J J, GU B L. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of $GaAs_x$-Ga_{1-x}AlAs[J]. Phys. Rev. B,1990,41(9):6001-6007.

[9] ZHU J L, ZHAO J H, XIONG J J. Dimensionality and potential-shape effects on D^0 and D^- ground states in quantum dots[J]. Phys. Rev. B,1994,50(3):1832-1838.

[10] JIANG Z X, MCCOMBE B D, ZHU J L, et al. Magnetic-field-induced unbinding of the off well-center D^{-1} singlet state in GaAs-GaAlAs quantum well[J]. Phys . Rev . B, 1997, 56:R1692-1695.

[11] CHARROUR R, BOUHASSOUNE M, FLIYOU M, et al. Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in cyliderical quantum dot[J]. Physica B,2000, 293: 137-143.

[12] WENDLER L, CHAPLIK A V, HAUPT R, et al. Magnetopolaron in quantum dots:

Comparison of polaronic effects from three toquasi-zero dimensions [J]. J. Phys. Condens. Matter, 1993, 5(43): 8031-8046.

[13] ZHOU H Y, GU S W, SHI Y M. Effects of strong coupling magnetiopolaron in quantum dots[J]. Modern Phys. Lett. B, 1998, 12(17): 693-701.

[14] ZHOU H Y, GU S W. Size and magnetic field dependence of strong coupling magnetopolaron in quantum dot[J]. J. Shanghai Univ., 1999, 3: 127-131.

[15] ZHOU H Y, GU S W. Energy levels of strong coupling magnetopolaron in quantum dot [J]. J. Shanghai Univ., 2001, 5(1): 40-43.

[16] LEE C M, GU S W. Polaron effect on energy spectrum in two-electron quantum dot under magnetic field[J]. Solid state communications, 2000, 116(1): 51-56.

[17] KANDEMIR B S, CETIN A. Ground-and first-excited state energies of impurity magnetopolaron in an anisotropic quantum dot[J]. Physical Review B, 2002, 65(5): 054303_11.

[18] WANG L G, JINGLIN X, LI S S. Properties of strong-coupling magnetopolaron in semiconductor quantum dot[J]. Chinese Journal of Semiconductors, 2004, 25(8): 937-940.

[19] JINGLIN X, WEI X. Effective mass of polaron in semiconductor quantum dots[J]. Chinese Journal of Semiconductors-Chinese Edition, 2004, 25(11): 1428-1432.

[20] PETER E, HOURS J, SENELLART P, et al. Phono sidebands in exciton and hiexciton emission from single GaAs quantum dots[J]. Phys. Rev. B, 2004, 69: 041307-1-4.

[21] WANG R P, XU G, JIN P, et al. Size dependence of electron-phonon coupling in ZnO nanowires[J]. Phys. Rev. B, 2004, 69: 13303_4.

[22] CHENG J L, WU M W, LU C. Spin relaxation in GaAs quantum dots [J]. Phys. Rev. B, 69: 115318_7.

[23] ZHAO C L, XIAO J L. Properties of weak-coupling polaron in cylindrical quantum dot [J]. J. Optoelectronics · Laser, 2004, 15(5): 630-632 (in Chinese).

[24] ZHAO C L, DING Z H, XIAO J L. Properties of weak-coupling magnetopolaron in cylindrical quantum dot[J]. Chin. J. Lumin., 2004, 25(3): 257-260.

[25] ZHAO C L, DING Z H, XIAO J L. Properties of a weak-coupling magnetopolaron in cylindrical quantum Dot [J]. Chinese Journal of Semiconductors 2005, 26(10): 1925-1928.

[26] ZHAO C L, DING Z H, XIAO J L. Renormalization mass of polaron in cylindrical quantum dot[J]. Chin. J. Lum in., 2005, 16(2): 159-162.