

含类氢杂质的量子点的基态能^{*}

王正茂 周义昌

(中山大学物理学系, 广州 510275)

摘要 用 Pekar-Landau 变分法计算了含类氢杂质的量子点基态能, 发现外磁场、量子点固有禁闭势、电子杂质相互作用、电声子相互作用对量子点基态能都有影响, 并有一定相互关系.

关键词 量子点, 类氢杂质, 电声子相互作用

分类号 O 413

随着微制造技术的发展, 将电子束缚在量子点 (QD) 中已成为可能. 量子点可看作一种人造原子, 只不过量子点的禁闭势取代了原子的库仑势. 近来有人研究了电声子耦合对 QD 系统能谱的影响, 它使 QD 系统产生能移. 其中有采用弱耦合条件^[1,2], 也有采用强耦合条件^[3]. Zhu 等人^[4]用 Pekar-Landau 变分法研究了外磁场存在时电声子耦合对 QD 系统基态能的影响, 但没有考虑 QD 中存在杂质的情况. Marson 等人研究了有杂质的量子阱的能谱^[5], 但选用的哈密顿量少了量子阱本身的禁闭势. 因此可以认为他们研究的对象并不等同于通常意义上的 QD 系统. Mu 等人^[6]研究了这种有杂质存在的 QD, 但没有同时考虑电声子耦合. 鉴于上述考虑, 本文用 Pekar-Landau 法研究了外磁场、QD 固有禁闭作用、电子杂质相互作用以及电声子相互作用对 QD 系统基态能的影响及这些影响间的相互关系.

1 基本理论

我们研究的 QD 系统其哈密顿量为:

$$H = (1/2m^*) (p + ea)^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 d^2 + H_{ph} + H_{e-ph} - e^2 / \epsilon d \quad (1)$$

$$H_{ph} = \sum_q \hbar \omega_{Lo} b_q^\dagger b_q \quad (2)$$

$$H_{e-ph} = \sum_q (V_q e^{iq \cdot \vec{d}} b_q^\dagger + V_q^* e^{-iq \cdot \vec{d}} b_q) \quad (3)$$

其中 m^* 表示电子的有效质量. 为明确起见, 假设电子在 $x-y$ 平面运动, d 表示极坐标. A 是相应于 Z 方向上磁场 B 的磁矢势. 按对称规范 $A = (-By/2, Bx/2, 0)$. H_{ph} 和 H_{e-ph} 分别表示声子项及电声子耦合项. 其中 ω_{Lo} 表示声子频率, b_q^\dagger 、 b_q 分别表示声子的产生算符和湮没算符. 由于本文研究的是没有厚度的 QD 系统, 故这里的 V_q 是二维情况下的电声子耦合系数.

* 收稿日期: 1995-12-29 王正茂, 男, 26 岁, 硕士研究生, 现任职于广东民族学院

$$V_q = i(2cT)^{\frac{1}{2}} / \bar{q} \quad (4)$$

T 为无量纲常数. 采用极坐标形式, 哈密顿量可写成:

$$H = - (\hbar^2 / 2m^*) \nabla^2 + \frac{1}{2} w_c L_z + \frac{1}{2} m^* w^2 r^2 + H_{ph} + H_{e-ph} - e^2 \lambda d \quad (5)$$

其中 $w^2 = w_0^2 + (w_c/2)^2$, $w_c = eB / m^* c$, L_z 是 Z 方向的角动量算符.

下面用 Peker-Landau 法求 QD 系统基态能, 首先取如下试探波函数

$$|j\rangle = |h(d)\rangle \exp\left(\sum_q (f_q^* b_q^* - f_q b_q)\right) |O_q\rangle \quad (6)$$

其中 $|h(d)\rangle$ 是电子波函数, 考虑到 QD 中类氢杂质中心的存在, 选用 $|h(d)\rangle = (2/c)^{\frac{1}{2}} U e^{-U r}$. 其中 U 是变分常数, $U > 0$. f_q, f_q^* 是变分函数. $|O_q\rangle$ 是声子真空态 $\exp\left(\sum_q (f_q^* b_q^* - f_q b_q)\right) |O_q\rangle$ 实际上是声子相干态.

QD 系统的基态能为

$$E(U) = (\hbar^2 U^2 / 2m^*) + (3m^* w^2 / 4U) - (2e^2 U / \lambda) - (3cT / 8) w_{LO} \quad (7)$$

其中 U 满足方程

$$\partial E(U) / \partial U = 0 \quad (8)$$

采用极化子单位 ($\hbar = 2m^* = w_{LO} = 1$) 且采用如下记号. $V = w_c w_{LO}$, V 是反映磁场强弱的一个参数. $u = l_0 / r_0$, $l_0 = (\hbar / m^* w_0)^{\frac{1}{2}}$, l_0 是 QD 的有效束缚长度. $r_0 = (\hbar / 2m^* w_{LO})^{\frac{1}{2}}$, r_0 是极化子半径. u 则是反映 QD 固有禁闭势大小的参数. $\lambda = e^2 \lambda$ 是反映电子杂质相互作用强度的参数. (7) 式可写成

$$E(U) = U^2 + (3u^4 / 2U) + (3V^2 / 32U) - 2U - (3cT / 8) U \quad (9)$$

$T = 0$ 时 (即不考虑电声子耦合) QD 系统的基态能为

$$E_1(U) = U^2 + (3u^4 / 2U) + (3V^2 / 32U) - 2U \quad (10)$$

其中 U 满足

$$\partial E_1(U) / \partial U = 0 \quad (11)$$

最后得到由于电声子耦合而使 QD 系统增加的束缚能

$$\Delta E = E_1(U) - E(U) \quad (12)$$

2 数值计算及讨论

图 1 是 $E \lambda$ 曲线. 可以看出, λ 越大, 电子与杂质中心相互作用就越强, QD 系统的基态能就降低多一些. 从图 1(a) 还可看出, 当 u, V 取相同值, 而 T 取不同值时, $E \lambda$ 曲线有所不同. 当 T 取值较大, E 的取值较小且随 λ 的变化更明显. 这说明电声子耦合能影响电子与杂质中心的相互作用. 电声子耦合越强, 电子与杂质中心的相互作用就越强. 从上面图 1(b) 可以看出, 当 u, T 取相同值, V 取不同值时, $E \lambda$ 曲线变化很小. 这说明磁场对电子与杂质中心的相互作用影响很小.

图 2 是 $\Delta E \lambda$ 曲线. 可以看出, ΔE 总取正值, 这说明电声子相互作用总是使 QD 的基态能降低, 从而使 QD 系统更稳定. 将图 1(a) 与图 1(b) 比较, 可以看出电声子耦合引起的能移是不可忽略的. 从图 2 可以看出 ΔE 随 λ 的增大而增大. 这说明电子与杂质中心的相互作用越强, 电声子相互作用也越强. 这一点与 Marson 的结论是一致的^[5]. 从图 2(a) 可以看出, 当 u, T 相同, 而 V 取不同值时, 若 λ 取值较小, $\Delta E \lambda$ 曲线有较大变化, 若 λ 取值较大, ΔE

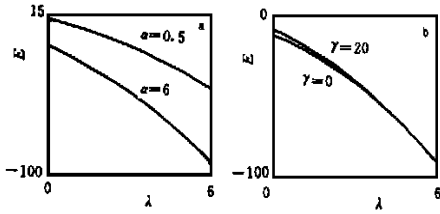


图 1 基态能随 λ 的变化

Fig. 1 Ground state energy in different λ

(a) $u = 0.5, V = 20$; (b) $u = 0.5, T = 6$

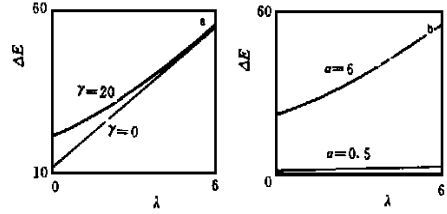


图 2 束缚能随 λ 的变化

Fig. 2 Bound energy in different λ

(a) $u = 0.5, T = 6$; (b) $u = 0.5, V = 20$

λ 曲线变化很小。这说明当电子与杂质中心相互作用较弱时,外磁场对电子杂质相互作用与电声子相互作用之间的关系影响较大,反之则几乎没什么影响。从图 2(b)可以看出,当 u, V 取值相同而 T 不同时, $\Delta E-\lambda$ 曲线不同,当 T 取值较大, ΔE 的取值也就较大且 ΔE 随 λ 的增大而增大得更快。只要记住 T 是反映电声子耦合强度的参数,这一点就可以理解了。

图 3(a)是 $E-T$ 曲线。从中看出, E 随 T 的增加而减小。还可以看出,只有当电声子耦合较弱 (T 较小) 时,电声子耦合对基态能的影响才比较明显地与外磁场 (由 V 表征) 有关。

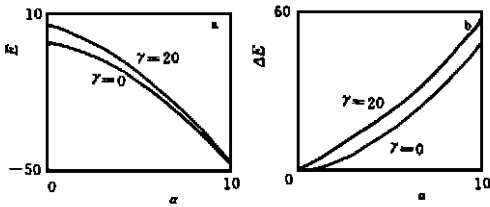


图 3 基态能 (a) 和束缚能 (b) 随 λ 变化

Fig. 3 Ground state energy (a) and bound energy (b) in different λ

(a) $\lambda = 1, u = 0.5$; (b) $\lambda = 1, u = 0.5$

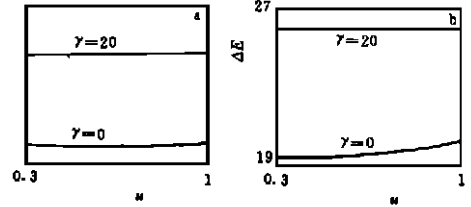


图 4 基态能 (a) 和束缚能 (b) 随 u 的变化

Fig. 4 Ground state energy (a) and bound energy (b) in different u

(a) $T = 6, \lambda = 1$; (b) $T = 6, \lambda = 1$

图 3(b)是 $\Delta E-T$ 曲线。 ΔE 随 T 增大而增大。外磁场对 $\Delta E-T$ 关系影响较小,当 V 取值较大时, ΔE 的值只是略微增大。这一点与 Zhu^[4] 的结论是相似的。

图 4(a)是 $E-u$ 曲线。 E 随 u 的增大而增大。这说明 QD 固有禁闭作用越强, QD 的基态能越低, QD 越稳定。这一点与 Mu^[6] 是一致的。进一步可看出 V 取值较大时, E 的取值较大, $E-u$ 曲线的形状则变化很小。这说明外磁场的存在增大了 QD 系统的基态能,而对 QD 固有禁闭作用对 QD 基态能的影响改变很小。

图 4(b)是 $\Delta E-u$ 曲线。从中看出电声子耦合导致的能移随 u 的增大而增大。这一点与 Zhu^[4] 不同。这与本文考虑杂质的影响有关。另外,外磁场较强时,电声子耦合导致的能移也较大。

3 结 论

本文考察了外磁场、QD 固有禁闭作用、电子杂质相互作用和电声子相互作用对 QD 系统基态能的影响及这些影响间的相互关系。QD 固有禁闭作用、电子杂质相互作用及电声子相互作用都能降低 QD 系统的基态能,电子杂质相互作用可以增强电声子相互作用导致的

QD的能移,反之亦然.此外,外磁场可增大 QD系统的基态能,也可增大电声子耦合导致的能移.本文的结论有助于加深对 QD系统的认识.

参 考 文 献

- 1 Degani M H, Farias G A. Polaron effects in one dimensional lateral quantum wires and parabolic quantum dots. *Phys Rev*, 1990, B42: 11950
- 2 Yidirim T, Ercelebi A. The ground-state description of the optical polaron versus the effective dimensionality in quantum-well-type systems. *J Phys(Condens Matter)*, 1991, 3: 1271
- 3 Chatterjee A. Strong-coupling theory for the multidimensional free optical polaron. *Phys Rev*, 1990, B41: 1668
- 4 Zhu Ka-Di, Takayoshi Kobayashi. Magnetic field effects on strong-coupling polarons in quantum dots. *Phys Lett*, 1994, A190: 337
- 5 Marson B A, Sarma S D. Phonon-induced shift in shallow donor levels of semiconductor quantum structures. *Phys Rev*, 1986, B33: 8379
- 6 Mu Yao-Ming, Lu Wei, Shen S C. Hydrogenic impurities in two-dimensional circular confined system at arbitrary magnetic fields. *Phys Lett*, 1995, A197: 428

The Ground-State Energy of a Quantum Dot with Impurity

Wang Zhengmao^{*} *Zhou Yichang*

Abstract The ground-state energy of a quantum dot(QD) with a hydrogenic impurity in its center, is studied by Peker-landau variational method. It is found that the external magnetic field, the confining potential of QD, the electron-impurity interaction and the electron-phonon interaction have different effects on the ground-state energy of QD, and there are some relations between these effects.

Keywords quantum dot, hydrogenic-like impurity, electron-phonon interaction

^{*} Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275