

文章编号: 1001 - 9014 (2005) 02 - 0089 - 04

# 量子阱中强耦合极化子自陷能的温度依赖性

额尔敦朝鲁

(河北科技师范学院 数理系, 河北 秦皇岛 066044)

**摘要:** 采用 Huybrechts 的线性组合算符法和改进的 LLP 变分法, 研究了晶格热振动对无限势垒量子阱中电子与界面光学声子强耦合、与体纵光学声子弱耦合极化子性质的影响. 推导出作为阱宽和温度函数的极化子自陷能的表达式. 对 KI/AgCl/KI 量子阱进行了数值计算, 结果表明, 极化子的自陷能随阱宽增加而减小、随温度升高而减小, 但不同支声子与电子相互作用对极化子自陷能的贡献以及它们随阱宽和温度的变化情况大不相同.

**关键词:** 量子阱; 强耦合极化子; 自陷能; 温度依赖性

**中图分类号:** O471. 4 **文献标识码:** A

## TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE SELF-TRAPPING ENERGY OF STRONG-COUPLING POLARON IN A QUANTUM WELL

Eerdunchaolu

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

**Abstract:** The effects of lattice vibration on the properties of the polaron, which was weakly coupled with bulk longitudinal optical phonons and strongly coupled interface optical phonons, in an infinite quantum well were studied by means of the Huybrechts' linear-combination operator and a modified LLP variational method. The expressions for the self-trapping energy of the polaron in a quantum well as a function of the well's width and temperature were derived. Numerical results of the polaron self-trapping energy for KI/AgCl/KI QW show that the self-trapping energy of the polaron will decrease with increasing the well's width and temperature, but the contribution of interaction between the electron and the different branch of phonons to the self-trapping energy and their changing with the well's width and temperature are different.

**Key words:** quantum well; strong-coupling polaron; self-trapping energy; temperature dependence

### 引言

随着材料生产技术的发展以及半导体量子阱和超晶格在实验上的实现, 超晶格和异质结的研究日益为各国更多的物理学家所注意. 该研究不仅具有理论上的意义, 而且在实验上和高技术产业方面也发挥着不可估量的作用. 极性膜和量子阱是超晶格和异质结的最基本单元, 因而, 深入研究极性膜和量子阱中电子态的性质至关重要.

在量子阱的研究中, Morri 等人<sup>[1]</sup>和 Liang 等人<sup>[2]</sup>分别各自独立的导出了量子阱中晶格振动的光学极化模以及电子与光学声子相互作用的哈密顿量. 他们发现, 在量子阱结构中, 除了众所周知的束

缚体纵光学 (Longitudinal Optical, LO) 声子模外, 还存在 4 支界面光学 (Interface Optical, IO) 声子模, 这些模的本征矢和电子-声子耦合函数被局域在量子阱的界面附近, 并且对极化子的性质产生影响.

由于极性膜和量子阱中的极化子问题要比体材料复杂得多, 所以, 必须采用近似方法. 多年来, 人们采用微扰法<sup>[3]</sup>、LLP 变分法<sup>[4]</sup>、Feynman 路径积分法<sup>[5]</sup>和 Green 函数法<sup>[6]</sup>等多种方法, 对极性膜和量子阱中电子的性质进行了广泛的研究. 然而多数工作仅限于讨论电子-声子弱、中耦合情形, 并且为了简单起见, 大多都假设体系处于零温极限 (0K). 它们对 III-V 族化合物材料无疑是正确的.

随着分子束外延等技术的发展, 近年来, II-VI

收稿日期: 2004 - 04 - 09, 修回日期: 2004 - 11 - 11

Received date: 2004 - 04 - 09, revised date: 2004 - 11 - 11

基金项目: 国家自然科学基金 (10174076) 和内蒙古自然科学基金 (200208020110) 资助项目

作者简介: 额尔敦朝鲁 (1960-), 男, 蒙古族, 内蒙古通辽市人, 教授, 主要从事量子阱和异质结构中激子和极化子的研究.

族化合物材料已被广泛注意,一般而言,这些材料中的电子-声子耦合常数比 III-V 族化合物材料中的电子-声子耦合常数要大一个数量级,对于 I-VII 族的极性晶体,其电子-声子之间的耦合更强,以至弱耦合理论不再适用. 随着技术的进步,这些新材料在光电子器件等方面有着潜在的应用价值,越来越引起人们的兴趣. 对于体极化子,弱、中耦合理论适用于电子-体纵光学声子耦合常数小于 6 的情形<sup>[7]</sup>,而对于表面或界面极化子这种限制约为 2.5<sup>[8]</sup>,所以当电子与表面或界面光学声子的耦合常数大于 2.5 时,就必须采用强耦合理论. 二十世纪七十年代, Huybrechts<sup>[9]</sup>曾提出一种关于强耦合极化子的线性组合算符法,将强耦合极化子描述为一个在抛物势阱中谐振的准粒子. 这种方法对强耦合问题的处理与其他人的结果<sup>[10,11]</sup>一致,而且具有简单直观的优点.

本文在 Huybrechts 关于强耦合极化子的模型基础上,采用改进的 LLP 变分法,研究了晶格热振动对无限势垒量子阱中电子与 IO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合极化子的影响. 推导出作为阱宽和温度函数的极化子自陷能的表达式. 对 KI/AgCl/KI 量子阱进行了数值计算,结果表明,极化子的自陷能随阱宽的增加而减小、随温度的升高而减小,但不同支声子与电子相互作用对极化子自陷能的贡献以及它们随阱宽和温度的变化情况大不相同.

## 1 哈密顿量与变分计算

考虑被限制在一个无限高势垒量子阱中的电子,设由 2 种极性介质组成一个对称量子阱,其中厚度为  $2d$  的极性介质作为阱材料“1”,垒材料则为两边对称的无限大极性介质“2”. 在有效质量近似下,电子-晶格系统的哈密顿量可以写成<sup>[2,3]</sup>:

$$H = \frac{P^2}{2m^*} + U(z) + \sum_{kmp} \hbar\omega_{L1} a_{kmp}^+ a_{kmp} + \sum_{kmp} [V_{kmp}(z) e^{ik \cdot \rho} a_{kmp} + \text{H. c.}] + \sum_{q\sigma t} \hbar\omega_{\sigma t} b_{q\sigma t}^+ b_{q\sigma t} + \sum_{q\sigma t} [W_{q\sigma t}(z) e^{iq \cdot \rho} b_{q\sigma t} + \text{H. c.}], \quad (1)$$

(1) 式中各量的意义与文献<sup>[2,4]</sup>相同.

首先对电子的  $x-y$  方向运动的动量和坐标引入 Huybrechts 线性组合算符<sup>[9]</sup>,并对哈密顿量  $H$  作 2 次幺正变换,然后再计算其在  $|\psi\rangle$  态中的期待值  $\bar{H}$

$$\bar{H} = \langle \psi | U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 | \psi \rangle. \quad (2)$$

这里

$$U_1 = \exp[-i(\sum_{kmp} A_1 a_{kmp}^+ a_{kmp} \mathbf{k} + \sum_{q\sigma t} A_2 b_{q\sigma t}^+ b_{q\sigma t} \mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\rho}]. \quad (3)$$

是改进的 LLP 变换,其中  $A_i (i=1,2)$  是表征电子-声子耦合程度的物理量,对于我们所研究的电子与 IO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合体系,  $A_1 = 1$  和  $A_2 = 0$ <sup>[9,11]</sup>.

$$U_2 = \exp\left\{\sum_{kmp} [f_{kmp} \text{csn}(k_m z) a_{kmp}^+ - f_{kmp}^* \text{csn}(k_m z) a_{kmp}] + \sum_{q\sigma t} (g_{q\sigma t} b_{q\sigma t}^+ - g_{q\sigma t}^* b_{q\sigma t})\right\}. \quad (4)$$

是改进的第二 LLP 变换<sup>[9,11]</sup>,其中  $f_{kmi}$  ( $f_{kmi}^*$ ) 和  $g_{q\sigma t}$  ( $g_{q\sigma t}^*$ ) 均为变分参量.

$$|\psi\rangle = |\phi_l\rangle | \{n_j\} \rangle | \{n_k\} \rangle | \{n_q\} \rangle. \quad (5)$$

是有限温度下的变分波函数<sup>[12]</sup>,其中  $|\phi_l(z)\rangle$  是无限势垒量子阱中电子的  $z$  方向运动的本征波函数,对应的能量本征值为  $\varepsilon_l$ .  $| \{n_j\} \rangle$ ,  $| \{n_k\} \rangle$  和  $| \{n_q\} \rangle$  分别表示极化子态、LO 和 IO 声子态的波函数,其中  $\{n_j\}$  表示极化子数,  $\{n_k\}$  和  $\{n_q\}$  分别表示 LO 声子数和 IO 声子数.

将式(3)~式(5)代入式(2),再用变分技术求出变分参量,并把各变分参量代回  $\bar{H}$  中,可得量子阱中极化子能量期待值的极值表达式

$$\bar{H}_0 = \varepsilon_l + \sum_{kmp} n_k \hbar\omega_{L1} + \sum_{q\sigma t} n_q \hbar\omega_{\sigma t} - E_{e-\text{ph}}^{\text{tr}}, \quad (6)$$

式中  $E_{e-\text{ph}}^{\text{tr}}$  是量子阱中极化子的自陷能,

$$E_{e-\text{ph}}^{\text{tr}} = E_{e-\text{LO}}^{\text{tr}} + E_{e-\text{IO}}^{\text{tr}}, \quad (7)$$

其中

$$E_{e-\text{LO}}^{\text{tr}} = \frac{3\alpha_{L1} \hbar\omega_{L1}}{4du_l} \frac{1}{1 - \frac{\pi^2(2n_k+1)}{6d^2u_l^2}} \ln\left(\frac{1}{3} + \frac{4d^2u_l^2}{\pi^2(2n_k+1)}\right) + \frac{\alpha_{L1} \hbar\omega_{L1}}{2du_l} \sum_{m=2,3,4,\dots}^{d/a} \ln\left(\frac{4d^2u_l^2}{m^2\pi^2(2n_k+1)}\right), \quad (8)$$

$$E_{e-\text{IO}}^{\text{tr}} = \frac{8\pi^2 \varepsilon_{01} \varepsilon_{\infty 1} \alpha_{L1} \hbar\omega_{L1}}{du_l (\varepsilon_{01} - \varepsilon_{\infty 1})} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} \frac{D_{\sigma+}^2(x) \tanh^2(x)}{x^2 (\pi^2 + x^2)^2 \omega_{\sigma+}^2} e^{-\frac{\omega_{L1} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda}} \times \left(1 - n \frac{\omega_{L1} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda}\right) dx - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\lambda. \quad (9)$$

在推导中考虑了电子在  $x-y$  平面内运动的对称性,  $n = n_j (j=x, y)$ , 并忽略了多声子之间相互作用引起的小项和波矢的高阶小项的贡献. 另外,为了方便起见,我们假定电子  $z$  方向的运动仍处于基态 ( $l=1$ ), 并令  $m_{\parallel} = m_x = m_y$ .

式(7)~式(9)表明,量子阱中极化子的自陷能由两部分组成:一部分是由于电子-LO 声子相互作用所引起的极化子效应,另一部分则是电子-IO

声子相互作用所诱生的极化子的自陷能. 由式(9)可以看出,在4支IO声子与电子相互作用当中,只有频率为 $\omega_{++}$ 和 $\omega_{-+}$ 的2支IO声子与电子相互作用对极化子的自陷能有贡献,而频率为 $\omega_{+-}$ 和 $\omega_{--}$ 的另外2支IO声子与电子相互作用对极化子的自陷能没有贡献.

## 2 温度依赖性

在有限温度下,电子-声子系不完全处于基态,晶格热振动不但激发实声子,同时也使电子受到激发,极化子的性质是电子-声子系对各种可能状态的统计平均,它们遵从玻色统计. 由此我们可以得到极化子的自陷能与阱宽和温度的关系.

## 3 数值分析与讨论

为了更清楚地说明量子阱中电子与LO声子弱耦合、与IO声子强耦合极化子的自陷能随温度的变化规律,我们选择了一对具有较大电子-IO声子耦合常数和较小电子-LO声子耦合常数的材料AgCl和KI作为量子阱内、外极性晶体进行数值计算. 所用材料的参数取自文献[13],数值结果分别示于图1和图2. 图中选取极化子的半径 $r_p$ 为长度单位,以 $\alpha_{L1} \hbar \omega_{L1}$ 作为能量单位.

图1描绘了KI/AgCl/KI量子阱中频率为 $\omega_{++}$ 和 $\omega_{-+}$ 的2支IO声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的自陷能 $E_{e-10(++)}^p$ 和 $E_{e-10(-+)}^p$ ,以及这两支IO声子同时与电子相互作用时所诱生的极化子的自陷能 $E_{e-10}^p$ 在不同温度 $T$ 时随量子阱半阱宽(以下简称阱宽) $d$ 的变化关系. 图中点划线表示二维结果. 由图1可以看出,自陷能 $E_{e-10(++)}^p$ 、 $E_{e-10(-+)}^p$ 和 $E_{e-10}^p$ 均随阱宽 $d$ 的增加而减小,而且可以看出在量子阱宽较小时,电子与IO声子的耦合较强,在量子阱较宽的情况下,电子与IO声子的相互作用就比较弱了. 图1还表明,无论是 $E_{e-10(++)}^p$ 和 $E_{e-10(-+)}^p$ ,还是 $E_{e-10}^p$ 都随温度 $T$ 的升高而减小. 由图1不难看出,量子阱中不同支声子与电子相互作用对极化子自陷能的贡献也不同,频率为 $\omega_{++}$ 的IO声子与电子相互作用所诱生的自陷能 $E_{e-10(++)}^p$ 的值较频率为 $\omega_{-+}$ 的IO声子与电子相互作用所诱生的自陷能 $E_{e-10(-+)}^p$ 的值要明显大些,且当阱宽 $d \rightarrow 0$ 时,频率为 $\omega_{++}$ 的IO声子与电子相互作用所诱生的自陷能 $E_{e-10(++)}^p$ 的取值将趋近一定值 $\pi \alpha_{L1}^2 \hbar \omega_{L1} / 8$ ,该值就是文献[14]给出的二维强耦合极化子的自陷能的结果. 表明量子阱中局域声子

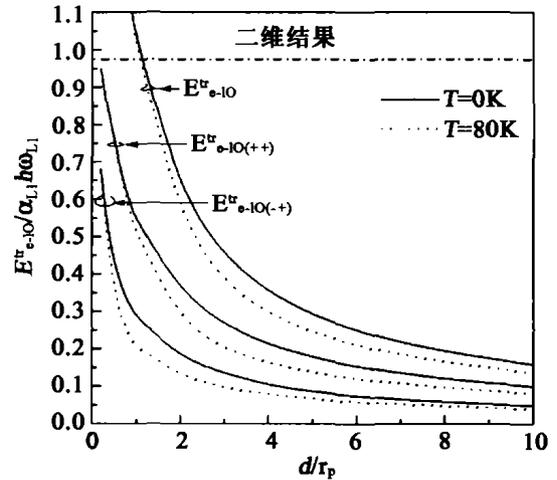


图1 IO声子与电子相互作用所诱生的极化子的自陷能随阱宽和温度的变化

Fig. 1 Variations of the self-trapping energy of the polaron induced by the IO phonons-electron interaction with the well's width and temperature

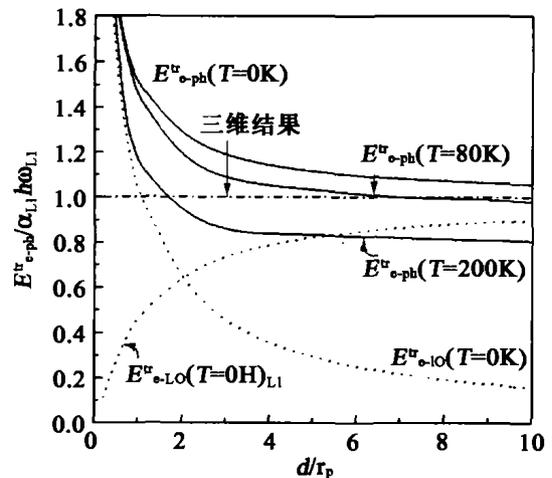


图2 极化子的自陷能随阱宽和温度的变化

Fig. 2 Variations of the self-trapping energy of the polaron with the well's width and temperature

的性质以及它们对极化子产生的影响与二维或三维声子不同. 同时也发现,在KI/AgCl/K量子阱中电子同时与2支IO声子相互作用所诱生的极化子的自陷能 $E_{e-10}^p$ 并不等于这2支IO声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的自陷能之和,即 $E_{e-10}^p \neq E_{e-10(++)}^p + E_{e-10(-+)}^p$ . 这一结果说明,电子与不同支IO声子相互作用对极化子自陷能的贡献不是线性的,它反映了界面声子的色散对电子-声子相互作用是有影响的,这是这种量子阱异质结构所造成的一个突出问题.

图 2 描绘了 KI/AgCl/KI 量子阱中极化子的总自陷能  $E_{e-ph}^u$  在不同温度  $T$  时随阱宽  $d$  的变化关系。图中 2 条虚线分别表示 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的自陷能  $E_{e-IO}^u$  和 LO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的自陷能  $E_{e-LO}^u$  在  $T=0K$  时随阱宽  $d$  的变化关系,点划线表示三维结果。由图 2 可以看出,电子与 LO 声子相互作用所诱生的自陷能  $E_{e-LO}^u$  在  $d < 6r_p$  时,随阱宽  $d$  的增加而迅速增加,在阱宽  $d > 12r_p$  时,它随阱宽  $d$  的增加而缓慢增加,最后趋于一定值,这个结果与文献 [15] 得到的三维弱耦合极化子自陷能的结论相同。电子与 IO 声子相互作用所诱生的自陷能  $E_{e-IO}^u$  在阱宽较窄时很大,但随阱宽  $d$  的增加而迅速减小,最后趋于零。这说明在量子阱宽度较小时,IO 声子的作用尤为重要。由图 2 不难看出, KI/AgCl/KI 量子阱中极化子的总自陷能  $E_{e-ph}^u$  随阱宽  $d$  的增加而迅速减小,且最后缓慢趋向三维结果  $\alpha_{L1} \hbar \omega_{L1}$ 。这说明,在阱宽较窄时,电子与 IO 声子相互作用对自陷能的贡献是主要的,随着阱宽  $d$  的增加,电子与 LO 声子相互作用对自陷能的贡献占主导地位。另外,图 2 还表明,极化子的总自陷能  $E_{e-ph}^u$  随温度  $T$  的升高而减小,这一结果与文献 [2] 的结论一致,表明了晶格热振动会削弱电子-声子间的耦合。可以想象,当温度高到一定程度时,极化子会出现一个由极化子态向自由电子态的准相变转化,这与文献 [6] 的结论一致,并且符合实际。图 2 还表明,当  $T < 80K$  时,极化子的自陷能  $E_{e-ph}^u$  随温度的变化不明显,但当  $T > 80K$  时,  $E_{e-ph}^u$  随温度升高而显著较小。

**致谢** 本文作者感谢肖景林教授和李树深研究员多年来的合作和帮助。

## REFERENCES

- [1] Mori N, Ando T. Electron-phonon interaction in single and double heterostructures [J]. *Phys. Rev.*, 1989, **B40**: 6175—6180.
- [2] Liang X X, Wang X. Electron-phonon interaction in a quantum well [J]. *Phys. Rev.*, 1991, **B43**: 5155—5161.
- [3] Hai G Q, Peeters F M, Devreese J T. Electron optical-phonon coupling in GaAs/Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As quantum wells due to interface, slab, and half-space modes [J]. *Phys. Rev.*, 1993, **B48**: 4666—4674.
- [4] Zheng R S, Ban S L, Liang X X. Effects of interface and bulk optical phonons on polarons in a quantum well [J]. *Phys. Rev.*, 1994, **B49**: 1796—1801.
- [5] Alexandrou C, Fleischer W, Rosenfelder R. Fourier path integrals, partial averaging, and the polaron problem [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**: 2615—2618.
- [6] Qin R H, Gu S W. Temperature dependence of the electron self-energy in a polar-crystal slab [J]. *Solid State Communication*, 1997, **104**: 425—428.
- [7] Haga E. Note on the slow electron in polar crystal [J]. *Prog. Theor. Phys.*, 1954, **11**: 449—460.
- [8] Pan J S. The surface or interface polaron in polar crystals [J]. *Phys. Stat. Sol(b)*, 1985, **B127**: 307—318.
- [9] Huybrechts J. Note on the ground-state energy of the Feynman polaron [J]. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1976, **9**: L211—212.
- [10] Feynman R P. Slow electrons in a polar crystal [J]. *Phys. Rev.*, 1955, **97**: 660—665.
- [11] Lee T D, Low F M, Pines D. The motion of slow electrons in a crystal [J]. *Phys. Rev.*, 1953, **90**: 297—302.
- [12] Li Y C, Gu S W. Temperature dependence of the effective mass of the interface polaron [J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 1990, **2**: 1149—1161.
- [13] Kartheuser E. *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors* [M], Amsterdam: North-Holland, 1972.
- [14] Hipolito O. Charged particle interaction with surface modes [J]. *Solid State Communication*, 1979, **32**: 515—519.
- [15] Tokuda N. A variational approach to the polaron problem [J]. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1980, **13**: L851—855.
- [16] Pan J S. The surface or interface polaron in polar crystals [J]. *Phys. Stat. Sol(b)*, 1985, **128**: 663—672.