

Rashba 效应对抛物量子阱中极化子基态能的影响*

单淑萍

福建龙岩学院机电工程学院, 364012

收稿日期: 2017-09-09; 接收日期: 2017-09-25

【摘要】 采用 LLP 变分法研究了抛物量子阱中极化子的 Rashba 效应, 得到了极化子基态能量的表达式, 并讨论了半阱宽及波矢与基态能量之间的关系. 结果显示, 基态能量是半阱宽和电子-声子耦合强度的减函数, 而是波矢的增函数. 由于 Rashba 效应基态能量零自旋轨道分裂成两支.

关键词: Rashba 效应; 抛物量子阱; 基态能量

PACS: 71.38.-k, 72.25.Dc

1 引言

半导体自旋电子学研究如何利用器件中电子的自旋自由度, 它起始于 1988 年. 由于具有重要的理论研究价值, 且使得自旋电子器件在高科技领域得到广泛的应用, 自旋电子学引起了众多科研工作者的广泛关注. Rashba 效应是自旋电子学的一个主要分支, 它在科技信息领域具有潜在的应用价值. 目前, 在低维量子体系中对 Rashba 效应的研究已有大量的报道, 尤其是在量子阱体系中对 Rashba 效应的研究比较多. 例如, Ganichev 等^[1]做了有关半导体量子阱 Rashba 和 Dresselhaus 的自旋分裂的实验, 通过实验得到了 Rashba 和 Dresselhaus 参量比值, 此实验开辟了一种新的方式来确定对自旋轨道耦合的不同贡献. Grunler^[2]对非对称量子阱零场自旋分裂进行了研究, 施加栅压非对称量子阱中 Rashba 分裂比较显著. 仇志军等^[3]研究了量子阱 SdH 振荡中的拍频现象, 发现在具有倒置能带结构的第三类量子阱 nHgTe/HgCdTe 中电子存在巨大的自旋分裂现象, 即 Rashba 自旋分裂. 徐天宁等^[4]数值计算了具有多个取向的 $\text{Pb}_{1-y}\text{Sr}_y\text{Te}/\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-y}\text{Sr}_y\text{Te}$ 非对称量子阱中的 Rashba 自旋分裂

能, 得到了自旋分裂能与量子阱非对称参量、阱宽、温度和波矢 k 的依赖关系. 研究表明: IV-VI 族半导体非对称量子阱比 III-V 族半导体非对称量子阱结构具有更大的 Rashba 自旋分裂能, 此结论使得 Rashba 效应在自旋电子器件领域可能具有潜在的应用价值. 王超等^[5]利用传递矩阵方法并根据量子相干输运理论, 在铁磁体/半导体多量子阱的一维结构中研究电子自旋输运性质, 计算发现一维多量子阱结构中的自旋电子输运性质发生了变化, 此变化有利于提高自旋电子的隧道系数和自旋极化率. 周远明等^[6]利用 $k \cdot p$ 理论研究了 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 窄禁带半导体量子阱结构中的 Rashba 自旋-轨道效应及其栅电压调控规律. 在其他低维量子体系中研究 Rashba 效应也比较常见, 如: Bandyopdhyay^[7]研究了 Rashba 效应影响下量子点中的自聚合纳米量子计算机, Tsitshvili 等^[8]从量子点中单电子的薛定谔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、能级和自旋反向驰豫时间, Tapash 和 Pekka^[9]深入研究了 Bychkov-Rashba 效应影响下量子点中几个电子的相互作用, Reyno 等^[10]研究了磁场和 Rashba 效应影响下的二维电子气的边界态. 付喜^[11]利用硬壁限制势下 Rashba 效应得到了两个

* 福建省教育厅 A 类课题资助(编号:JA15488)资助的课题.

非零自旋流密度分量和一个净自旋流密度.刘端阳等^[12]研究了平面一维波导系统中的 Rashba 电子波函数的输运性质,提出了电子一维量子波导理论可以被用来设计各种自旋极化器件.向洵^[13]研究了在有限长度半导体异质结的二维电子气中具有 Rashba 效应的电子输运特性.由薛定谔方程出发研究电子的透射系数、电子自旋及电导率,结果发现电子在垂直入射时能够得到电子的透射率、反射率以及自旋态的解析解.王娜等^[14]考虑自旋-轨道相互作用对极化子基态能量的影响,在低维半导体量子点体系中采用 LLP 变分法研究了电子-声子相互作用能.采用改进的线性组合算符和么正变换的方法,马新军等^[15]研究了 Rashba 效应影响下量子点中弱耦合极化子的性质,通过计算得到了 Rashba 效应影响下量子点中弱耦合极化子的振动频率、有效质量的表达式,以及基态能量、电子-声子相互作用能的表达式.采用改进的线性组合算符方法,白瑞锋等^[16]研究了 Rashba 效应影响下半导体量子点中强耦合极化子的光学声子平均数.计算得到了抛物量子点中极化子的光学声子平均数、振动频率、相互作用能和有效质量随受限强度和 Rashba 自旋-轨道耦合常数的变化关系.虽然科研工作者已经采用了多种方法对低维量子体系中 Rashba 效应进行了大量的研究,但到目前为止,很少有人采用 LLP 变分法对抛物量子阱中极化子的 Rashba 效应进行研究.在本篇文章中作者使用 LLP 变分法研究了 Rashba 效应对抛物量子阱中极化子性质的影响,得到了极化子基态能量的表达式,研究结果表明:基态能量不仅与波矢有关,而且还与半阱宽有关.最后,对基态能量进行了数值计算,并对结果进行了讨论,得到一个比较可信的结论.

2 理论模型

考虑在抛物量子阱中的一个电子与体纵光学声子场相互作用,由于讨论的是系统的基态,所以电子波函数被限制在阱内,电子-声子系统相互作用的波函数表示为:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(z) + \sum_k \hbar\omega_{LO} a_k^+ a_k + \sum_k [V_k a_k \exp(ik \cdot r) + h.c.] + \frac{\alpha_R}{\hbar} (\hat{\sigma} \times \hat{P})_z \quad (1)$$

这里 m 代表电子质量, $r = (\rho, z)$ 是电子的位置算符, a_k^+ (a_k) 是波矢为 k 频率为 ω_{LO} 的 LO 声子的产生(湮灭)算符, \hat{P} 和 $\hat{\sigma}$ 分别定义为电子动量算符和泡利矩阵算符. α_R 指的是 Rashba 参量,它与半导体结构的很多因素有关.这里 $V(z) = V_0 \left(\frac{z}{d}\right)^2$ 定义为电子势能项, d 和 V_0 分别表示半阱宽和抛物势阱深.相互作用的傅里叶系数表示为:

$$V_k = i \frac{\hbar\omega_{LO}}{k} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

V 是晶体体积, α 电子-声子耦合强度.为了使哈密顿量变得更简单,对自旋-轨道耦合项进行空间对角化

$$\frac{\alpha_R}{\hbar} (P_y \sigma_x - P_x \sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_R k_y + i\alpha_R k_x \\ \alpha_R k_y - i\alpha_R k_x & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

得到自旋轨道分裂能

$$\Delta E = \pm \alpha_R k \quad (4)$$

么正变换算符取为:

$$U = \exp\left(\sum_k (a_k^+ f_k - a_k f_k^*)\right) \quad (5)$$

对方程(1)进行么正变换

$$H' = \frac{P'^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} + V(z) + \sum_k \hbar\omega_{LO} (a_k^+ + f_k^*) (a_k + f_k) + \sum_k [V_k (a_k + f_k) e^{ik \cdot r} + h.c.] \pm \alpha_R k \quad (6)$$

式中 f_k 和 f_k^* 是变分参量,由能量对其求变分取最小值得.

选取基态尝试波函数:

$$|\psi\rangle = N e^{-\delta\rho} e^{-\beta z^2} (a' \chi_{\frac{1}{2}} + b' \chi_{-\frac{1}{2}}) |0\rangle_{ph} \quad (7)$$

由 $\langle\varphi|\varphi\rangle=1$, 可以得到 $N^2 = 4\delta^2 \sqrt{\frac{2\beta}{\pi}}$, $|0\rangle_{ph}$

是未微扰零声子态,满足 $a_k |0\rangle_{ph} = 0$. δ 和 β 是变分

参量. $\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $\chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 分别指的是自旋向上

和自旋向下态, a' 和 b' 是系数.基态能量期望值的表达式为

$$F = \langle\psi| \frac{P'^2}{2m} |\psi\rangle + \langle\psi| \frac{P_z^2}{2m} + V_z |\psi\rangle + \sum_k \hbar\omega_{LO} f_k^* f_k + \sum_k V_k f_k \langle\psi| e^{ik \cdot r} |\psi\rangle + V_k^* f_k^* \langle\psi| e^{-ik \cdot r} |\psi\rangle \pm \alpha_R k \quad (8)$$

由 $\frac{\partial F}{\partial f_k^*} = 0$, 得:

$$f_k = -\frac{V_k^* \langle \psi | e^{-ik \cdot r} | \psi \rangle}{\hbar \omega_{LO}} \quad (9A)$$

同理有:

$$f_k^* = -\frac{V_k \langle \psi | e^{ik \cdot r} | \psi \rangle}{\hbar \omega_{LO}} \quad (9B)$$

将 f_k 与 f_k^* 代入 F 中, 得到基态能量的表达式:

$$E_{\uparrow, \downarrow} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\pi \beta \hbar^2}{2m} \left(1 - \sqrt{\frac{2\beta}{\pi}} \right) + \frac{V_0 \pi}{8\beta d^2} - \frac{3\pi^2}{16} \alpha \hbar \omega_{LO} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{\frac{1}{2}} \delta \pm \alpha_R k \quad (10)$$

3 数值计算与结果讨论

为了研究 Rashba 效应对抛物量子阱中极化子性质的影响, 以 RbCl 晶体材料为例进行数值计算. 相应的参量选为: $\epsilon_0 = 12.83$, $\epsilon_\infty = 10.9$, $m = 0.432m_0$, $\hbar\omega_{LO} = 21.45 \text{ meV}$, m_0 为自由电子质量, 电子-声子耦合强度为 $\alpha = 4.2$. 数值计算结果在图 1 和图 2 中体现出来, 图中能量单位为 meV.

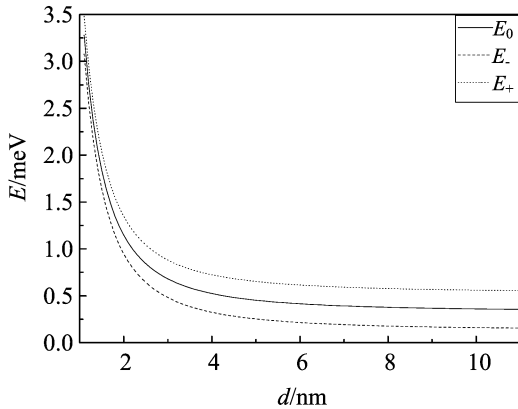


图 1 极化子零自旋轨道能量 E_0 , 自旋向上(自旋向下)分裂能 $E_+(E_-)$ 与半阱宽之间的关系曲线

图 1 表示极化子基态能量 E 与半阱宽 d 之间的关系曲线, 实线表示极化子零自旋轨道基态能量 E_0 , 点线表示极化子自旋向上分裂能 E_+ , 实点线表示极化子自旋向下分裂能 E_- . 从图中可以看出, 极化子基态能量是半阱宽的一个减函数, 即随着阱宽的增加, 极化子基态能量减小. 从图中还可以看出, 随着阱宽的减小, 极化子基态能量迅速增加, 体现了奇特的量子尺寸效应. 当 $d > 4 \text{ nm}$ 时, 基态能量趋向于一个常量. 一个有趣的物理现象在图 1 中体现出来, 基态能量分裂成两支, 随着阱宽的增加, 自旋

向上和自旋向下之间的能量裂距增加. Rashba 效应导致了能量分裂.

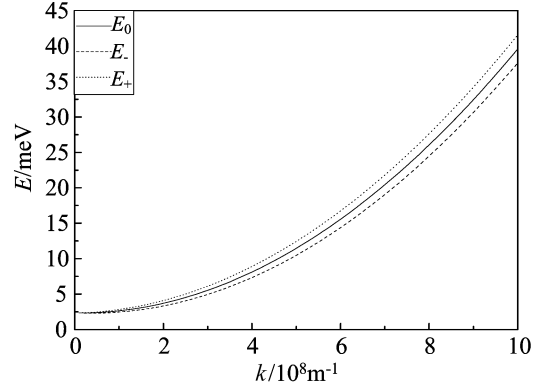


图 2 极化子零自旋轨道能量 E_0 , 自旋向上(自旋向下)分裂能 $E_+(E_-)$ 与波矢 k 之间的关系曲线

图 2 表示极化子基态能量 E 与波矢 k 之间的关系曲线, 实线表示极化子零自旋轨道基态能量 E_0 , 点线表示极化子自旋向上分裂能 E_+ , 实点线表示极化子自旋向下分裂能 E_- . 从图中可以看出, 由于 Rashba 效应, 零自旋轨道分裂能分裂成两条, 自旋向上和自旋向下分裂能之间的裂距随着波矢的增加而增加, 在 $k=0$ 附近, 能量分裂不明显. 从此图中看到, 极化子能量随着波矢的增加呈抛物线性增加, 这是由方程(10)决定的, 在方程(10)中波矢的平方对基态能量的贡献为正, 因此可以得到上面的结论.

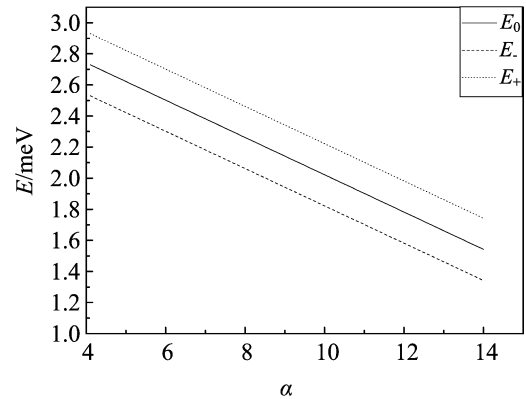


图 3 极化子零自旋轨道能量 E_0 , 自旋向上(自旋向下)分裂能 $E_+(E_-)$ 与电子-声子耦合强度之间的关系曲线

图 3 描绘了极化子基态能量 E 随电子-声子耦合强度 α 的变化关系曲线. 由图可以看出, 基态能量随着电子-声子耦合强度 α 的增加而减少, 耦合强度的增加使得电子-声子相互作用增强, 即电子-声子

相互作用能增大,但由式(10)的第四项可以看出,耦合强度对基态能量的影响为负,所以随着耦合强度的增加极化子基态能量减小.从图中还可以看出,基态能量 E 分裂成三支,且它们的变化趋势是一致的.究其原因,Rashba 效应的作用使得基态能量发生了分裂.这个现象再一次充分说明了轨道和不同方向的自旋相互作用对极化子基态能量的影响是不可忽略的.

4 结论

采用 LLP 变分法研究了抛物量子阱中极化子

的 Rashba 效应,计算结果表明,由于 Rashba 效应极化子零自旋轨道基态能量分裂成两支.然而每支并不代表自旋向上和自旋向下能量,而是表示自旋向上和自旋向下分裂能.因为自旋向上和自旋向下分裂能彼此之间会发生相互作用,在量子阱内不同自旋态电子浓度是不同的,也就是说自旋态被分成能态.因此,导致了极化子基态能量发生分裂.

参 考 文 献

- [1] D.Grundler.*Phys.Rev.Lett.***84**(2000):6074.
 [2] S.D.Ganichev, V. V. Belkov, L. E. Golub, et al..*Phys.Rev.Lett.***92**(2004):256601.
 [3] 仇志军,桂永胜,疏小舟等.物理学报,**53**(2004):1186.
 [4] 徐天宁,吴惠楨,隋成华.物理学报,**57**(2008):7865.
 [5] 王超,王玉玲.石家庄学院学报,**15**(2013):15.
 [6] 周远明,舒承志,梅菲等.材料导报,**28**(2014):160.
 [7] S.Bandyopadhyay.*Phys.Rev.B*,**61**(2000):13813.
 [8] E. Tsitsishvili, G. Lozano, A. O. Gogolin. *Phys. Rev. B*, **70**(2004):115316..
 [9] T.Chakraborty,P.Pietilainen.*Phys.Rev.B*,**71**(2005):113305.
 [10] A.Reyno,Gonzalo Usa.M.J.Sanchez,C.A.Balseio. *Phys.Rev.B*,**70**(2004):235344.
 [11] 付喜.湖南科技学院学报,**30**(2009):42.
 [12] 刘端阳,夏建白,张亚中.中国科学,**39**(2009):1286.
 [13] 向洵.装备制造技术,**5**(2007):28.
 [14] 王娜,肖景林.内蒙古民族大学学报,**23**(2008):244.
 [15] 马新军,肖景林.内蒙古民族大学学报,**25**(2010):242.
 [16] 白瑞锋,马新军,肖景林.内蒙古民族大学学报,**23**(2008):484.

Influence of Rashba Effect on the Ground State Energy of Polaron in a Parabolic Quantum Well

SHAN Shuping

College of Electromechanics, Fujian Longyan University, Longyan 364012, P.R.China

Received date: 2017-09-09; accepted date: 2017-09-25

【Abstract】 The polaron Rashba effect in a parabolic quantum well is studied by using LLP variational method. The ground state energy expression of polaron is derived and the relations between the ground state energy with the half well-width and wave vector are discussed, respectively. The results show that the ground state energy is a decreasing function of the half well-width and the electron-phonon coupling strength. However, the ground state energy is an increasing function of the wave vector. Due to the Rashba effect, the ground state energy of zero spin-orbit splits into two branches.

Keywords: Rashba effect, Parabolic quantum well, Ground state energy

PACS: 71.38.-k,72.25.Dc