

93-96

电子-声子相互作用对抛物量子线中 三次谐波产生的影响*

郭康贤 陈传誉

(广州师范学院物理系, 广东, 广州, 510400)

0471.1

A 摘要 理论上计算了电子-声子相互作用对抛物量子线中三次谐波产生的影响机制, 用量子力学中的密度矩阵算符理论推导了该系统中三次谐波产生的解析表达式, 以典型的 GaAs 量子线为例进行了数值计算.

③

关键词 电子-声子相互作用, 三次谐波产生, 密度矩阵算符.

量子线 半导体

引言

1975年由 Esaki 等人第一次提出了量子线和量子点的概念. 利用晶体生长技术, 现在已能生长纳米尺寸的线状半导体化合物^[1~4]. 在量子线结构中, 平行于线长方向的电子是准自由的, 而垂直于线长方向的电子受到束缚势的限制. 目前, 无论是从基础研究的观点还是从应用的观点来看, 低维量子系统中的非线性光学效应都引起了广泛兴趣, 这主要是由于低维量子系统展示了显著的光学非线性效应. 在线状的高分子聚合物中已经实验观察到很强的三阶非线性效应.

在最近二、三十年间, 低维量子系统中的极化子效应也是人们研究的热点. 有关这方面的理论研究表明^[5~7], 在低维半导体结构中电子更有效地与声子相互作用, 相应的某些物理量比体材料中的要大许多. 对于量子线结构, 已有许多人^[5~8]研究了电子-声子相互作用对其电子特性的影响. R. Chen 等人^[11]对 Si 量子线中的三阶非线性光学极化率作了研究, 不过, 他们主要是就激子效应对量子线三阶极化率的影响机制作了研究. 而本文是就电子-声子相互作用(即极化子效应)对抛物量子线中三次谐波产生的影响机制作了理论研究, 并以典型的 GaAs 量子线为例进行了数值计算.

1 理论推导

该系统的哈密顿量为

$$H = H_e + H_{LO} + H_{e-LO}, \quad (1)$$

$$\text{其中, } H_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2, \quad |x| \leq \frac{1}{2} L_x, \quad |y| \leq \frac{1}{2} L_y, \quad (2)$$

* 广东自然科学基金资助项目, 编号 A756
本文 1996 年 10 月 22 日收到, 修改稿 1996 年 12 月 28 日收到

$$H_{LO} = \sum_{k_z, m_1, m_2, \rho_1, \rho_2} \hbar \omega_{LO} A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}^+(k_z) A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}(k_z), \quad (3)$$

$$\begin{aligned}
 H_{e-LO} = 2\alpha' \sum_{k_z} e^{-ik_z z} \{ & \sum_{m_1=1,3,5,\dots} \sum_{m_2=1,3,5,\dots} \frac{\cos(\frac{m_1 \pi x}{L_x}) \cos(\frac{m_2 \pi y}{L_y})}{[K_z^2 + (\frac{m_1 \pi}{L_x})^2 + (\frac{m_2 \pi}{L_y})^2]^{1/2}} \\
 & [A_{m_1, +, m_2, +}(K_z) + A_{m_1, +, m_2, +}^+(-K_z)] + \\
 & \sum_{m_1=1,3,5,\dots} \sum_{m_2=2,4,6,\dots} \frac{\cos(\frac{m_1 \pi x}{L_x}) \sin(\frac{m_2 \pi y}{L_y})}{[K_z^2 + (\frac{m_1 \pi}{L_x})^2 + (\frac{m_2 \pi}{L_y})^2]^{1/2}} \\
 & [A_{m_1, +, m_2, -}(K_z) + A_{m_1, +, m_2, -}^+(-K_z)] + \\
 & \sum_{m_1=2,4,6,\dots} \sum_{m_2=1,3,5,\dots} \frac{\sin(\frac{m_1 \pi x}{L_x}) \cos(\frac{m_2 \pi y}{L_y})}{[K_z^2 + (\frac{m_1 \pi}{L_x})^2 + (\frac{m_2 \pi}{L_y})^2]^{1/2}} \\
 & [A_{m_1, -, m_2, +}(K_z) + A_{m_1, -, m_2, +}^+(-K_z)] + \\
 & \sum_{m_1=2,4,6,\dots} \sum_{m_2=2,4,6,\dots} \frac{\sin(\frac{m_1 \pi x}{L_x}) \sin(\frac{m_2 \pi y}{L_y})}{[K_z^2 + (\frac{m_1 \pi}{L_x})^2 + (\frac{m_2 \pi}{L_y})^2]^{1/2}} \\
 & [A_{m_1, -, m_2, -}(K_z) + A_{m_1, -, m_2, -}^+(-K_z)] \}. \quad (4)
 \end{aligned}$$

ω_0 是抛物势频率, L_x 和 L_y 分别是量子线在 x 和 y 方向上的线宽. 这里我们假定 $\omega_0 = \omega_{0x} = \omega_{0y}$, m^* 是电子的有效质量, $A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}^+(K_z)$ 和 $A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}(K_z)$ 分别是波矢为 K_z 、频率为 ω_{LO} 的纵光学声子的产生算符和消灭算符, m_1 和 m_2 是满足 $1 \leq m_1 \leq N_1/2$ ($L_x = N_1 a$), $1 \leq m_2 \leq N_2/2$ ($L_y = N_2 a$, a 是晶格常数) 的任意自然数. 当 m_1 和 m_2 是奇数或偶数时, P_1 和 P_2 为正(+) 或负(-). 式(4)中

$$\alpha' = \left[\frac{2\pi e^2}{V} \hbar \omega_{LO} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2}, \quad (5)$$

这里 V 是线体积 ($V = L_x L_y L_z$, L_z 是量子线的长度), ϵ_∞ 和 ϵ_0 分别是高频介电常数和低频介电常数.

为了便于把 z 坐标与 x, y 坐标分离开, 我们用了幺正变换 U 来处理式(1)中的哈密顿量:

$$U = \exp \left[-iz \sum_{k_z, m_1, m_2, \rho_1, \rho_2} K_z A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}^+(K_z) A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}(K_z) \right]. \quad (6)$$

另外, 由于 z 方向的总动量

$$P_z = -i \frac{\partial}{\partial z} + \sum_{K_z, m_1, m_2, \rho_1, \rho_2} A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}^+(K_z) A_{m_1, \rho_1, m_2, \rho_2}(K_z) \hbar K_z \quad (7)$$

与哈密顿量 H 对易,因此它可以约化成一个 C 数,而该系统的波函数可表示成

$$|\Psi_n(\vec{r}, \vec{K})\rangle = \frac{1}{L_z^{1/2}} \exp(i\hbar q_z Z) |\Phi(x, y)\rangle |n_k\rangle, \quad (8)$$

$|\Phi(x, y)\rangle$ 是量子线中 $x-y$ 平面的电子波函数, $|n_k\rangle$ 是声子波函数.

假定该系统受到一束场强为 $E(t) = E_0 \cos \omega t$ 的激光作用,利用密度矩阵算符方法^[9~10],我们就得到该系统中三次谐波产生 $\chi_{3\omega}^{(3)}$ 的解析表达式为

$$\begin{aligned} \chi_{3\omega}^{(3)} = & \frac{4}{3\hbar^3} \mu_{03} \mu_{32} \mu_{21} \mu_{10} \left\{ \frac{1}{[(\omega_{30} - 3\omega) - i\gamma_{30}][(\omega_{20} - 2\omega) - i\gamma_{20}][(\omega_{10} - \omega) - i\gamma_{10}]} + \right. \\ & \frac{1}{[(\omega_{23} - 3\omega) - i\gamma_{23}][(\omega_{13} - 2\omega) - i\gamma_{13}][(\omega_{30} - \omega) - i\gamma_{30}]} + \\ & \frac{1}{[(\omega_{23} - 3\omega) - i\gamma_{23}][(\omega_{31} - 2\omega) - i\gamma_{31}][(\omega_{10} - \omega) - i\gamma_{10}]} + \\ & \frac{1}{[(\omega_{13} - 3\omega) - i\gamma_{13}][(\omega_{20} - 2\omega) - i\gamma_{20}][(\omega_{30} - \omega) - i\gamma_{30}]} + \\ & \frac{1}{[(\omega_{32} - 3\omega) - i\gamma_{32}][(\omega_{20} - 2\omega) - i\gamma_{20}][(\omega_{10} - \omega) - i\gamma_{10}]} + \\ & \left. \frac{1}{[(\omega_{21} - 3\omega) - i\gamma_{21}][(\omega_{13} - 2\omega) - i\gamma_{13}][(\omega_{30} - \omega) - i\gamma_{30}]} + \right. \\ & \left. \frac{1}{[(\omega_{10} - 3\omega) - i\gamma_{10}][(\omega_{20} - 2\omega) - i\gamma_{20}][(\omega_{30} - \omega) - i\gamma_{30}]} \right\}, \quad (9) \end{aligned}$$

其中, γ_{nm} 是弛豫率,

$$\mu_{nm} = \langle \Psi_n | z | \Psi_m \rangle, (n, m = 0, 1, 2, 3), \quad (10)$$

$$\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar, (n, m = 0, 1, 2, 3). \quad (11)$$

从方程(8~11)可看出电子-声子相互作用对抛物量子线中三次谐波产生是有影响的.

2 数值计算与讨论

我们以 GaAs 为例进行数值计算. 计算中使用的参数为: $a = 5.654 \text{ \AA}$, $k_{LO} = 0.0252 \text{ \AA}^{-1}$, $\hbar\omega_{LO} = 36.7 \text{ meV}$, $\alpha' = 0.0681$.

图 1 中,根据数值计算结果,我们作出了对 3 种不同的 N_1 值 ($N_2 = 15$), $|\chi_{3\omega}^{(3)}|$ 随归一化光子能量 $\hbar\omega/\delta$ 的变化曲线, δ 是最高价带与最低导带之间的能量差. 从图中可以看出,当 $\hbar\omega = 0.39\delta$ 时曲线是发散的,这是由于电子-声子耦合效应导致的. 可以看出,当 N_1 取很小的值 ($N_1 \leq 20$) 时, $|\chi_{3\omega}^{(3)}|$ 分别在点 $\hbar\omega = 0.51\delta$ ($N_1 = 18$) 和 $\hbar\omega = 0.47\delta$ ($N_1 = 15$) 处有一个峰值;而

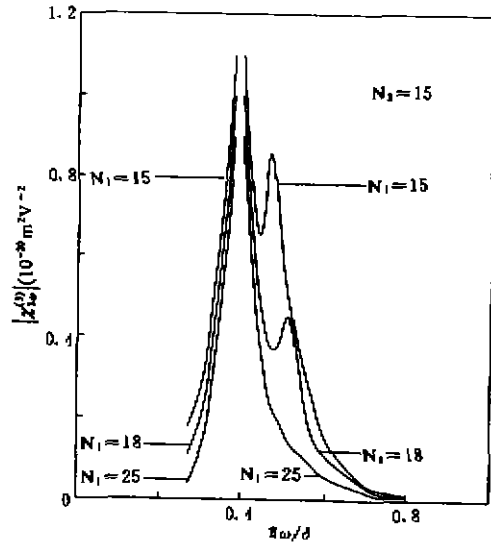


图 1 对于 3 种不同的 N_1 值 ($N_2 = 15$), $|\chi_{3\omega}^{(3)}|$

随归一化光子能量 $\hbar\omega/\delta$ 的变化曲线

Fig. 1 The calculated $|\chi_{3\omega}^{(3)}|$ versus the normalized photon energy $\hbar\omega/\delta$ for three values of the length of one side (N_1) of the wire with the length of the other side $N_2 = 15$

且,量子线的尺寸越小,峰就越尖锐,峰值越强.当 N_1 逐渐减小时,峰就随之往左边移动.一旦 N_1 大于 20,峰就消失.将 N_1 与 N_2 互换,我们会得到同样的结果.

我们目前尚未见到以 GaAs 量子线为非线性介质的实验数据,但我们的理论计算结果与线状高分子聚合物 (polyacetylene) 的实验数据^[5]非常相似.如果不考虑极化子效应,就不能得到这样的数值结果.小尺寸量子线结构中声子被强烈地束缚在线中,当线宽越来越大时,极化子效应会逐渐减弱,峰也会随之消失.因此,我们认为,这些峰值的出现主要是由电子-声子相互作用所致.同时也说明,对于很小的量子线结构,极化子效应是必须考虑的.

参考文献

- 1 Wheeler R G, Choi K K, Goel A, *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1982, **49**, 1674
- 2 Raals K S, Skocpol W J, Jackel L D, *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1984, **52**, 228
- 3 Thornton T J, Pepper M, Ahmed H, *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1986, **56**, 1198
- 4 Gershoni D, Weiner J S G, Chu S N, *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**, 163
- 5 Wu W. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, **61**, 1119
- 6 Larsen D M. *Phys. Rev.*, 1987, **B35**, 4435
- 7 Peeters F M, Devreese J T. *Phys. Rev.*, 1987, **B36**, 4442
- 8 Degani M H, Hipolito O. *Solid State Commun.*, 1988, **65**, 1185
- 9 Guo K X, Gu S W. *Phys. Rev.*, 1993, **B47**, 16322
- 10 Guo K X, Chen C Y. *J Phys. Condensed Matter*, 1995, **7**, 6583
- 11 Chen R, Lin D L, Mendoza B. *Phys. Rev.*, 1993, **B48**, 11879

INFLUENCE OF ELECTRON-PHONON INTERACTION ON THIRD-HARMONIC GENERATION IN A QUANTUM WIRE WITH PARABOLIC POTENTIAL *

Guo Kangxian Chen Chuanyu

(Department of Physics, Guangzhou Teachers' College, Guangzhou, Guangdong 510400, China)

Abstract Theoretical predictions of polaron effects on the third-harmonic generation in a rectangular quantum wire with an additional parabolic potential were presented. The formula for the third-harmonic generation along the wire was derived by the density matrix method. The numerical results were presented for a typical GaAs quantum wire.

Key words electron-phonon interaction, third-harmonic generation, density matrix operator.

* The project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China