

# 有限温度下 GaAs 极性膜内 极化子的有效质量

李 有 成

(河北师范大学物理系, 河北, 石家庄)

顾 世 洵

(上海交通大学应用物理系, 上海)

**摘要**——本文同时考虑了电子与 LO 声子及电子与表面光学(SO)声子两种相互作用, 采用 Lee-Low-Pines 变分法<sup>[4]</sup>, 导出了极性膜内极化子有效质量随温度变化的关系式, 并以 GaAs 晶体为例进行了数值计算和讨论。

**关键词**——薄膜, 极化分子有效质量, 温度特性。

## 1. 引 言

近年来, 由于异质结和超晶格等在技术上的广泛应用, 极化子有效质量的温度特性引起人们极大的兴趣<sup>[1~4]</sup>。然而, 对于极化子有效质量随温度的变化, 至今尚未得出一致的结论<sup>[5]</sup>。晶体内电子与声子的相互作用机制是决定有效质量温度特性的重要因素。目前, 已有不少工作<sup>[6~10]</sup>对二维(或准二维)和三维情形的电子与体纵光学(LO)声子的相互作用进行了研究和探讨。

本文同时考虑了电子与体 LO 声子和电子与表面光学(SO)声子两种相互作用, 采用 Lee-Low-Pines 变分法<sup>[11]</sup>导出了极性膜内弱、中耦合极化子的有效质量随温度变化的关系式, 并以 GaAs 晶体为例进行了数值计算。结果表明: 极化子有效质量将随温度的升高而减小; 在二维极限情况下, 有效质量的温度特性基本上完全由 SO 声子的作用决定。

## 2. 理 论

考虑一厚度为  $2d$  的晶体薄膜, 选取  $Z$  轴垂直于膜的表面, 膜的中心为其坐标原点,  $|Z|$

$\leq d$  部分是晶体,  $|Z| > d$  部分是真空, 为简单起见, 假设有效质量近似成立, 且膜表面上的势垒近似为无穷大, 膜内电子-声子体系的哈密顿量即可表示为

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

为了简化推导, 首先对  $H$  进行两次么正变换, 得到

$$H^* = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 \quad (2)$$

其中,

$$U_1 = \exp\{-i[\sum_{k,m,p} a_{m,p}^+(\mathbf{k}) a_{m,p}(\mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} + \sum_{q,p} b_p^+(\mathbf{q}) b_p(\mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}]\}; \quad (3a)$$

$$U_2 = \exp\{\sum_{k,m,p} [a_{m,p}^+(\mathbf{k}) f_{m,p}(\mathbf{k}) - a_{m,p}(\mathbf{k}) f_{m,p}^*(\mathbf{k})] + \sum_{q,p} [b_p^+(\mathbf{q}) g_p(\mathbf{q}) - b_p(\mathbf{q}) g_p^*(\mathbf{q})]\}; \quad (3b)$$

式(1~3)中, 各量的意义与文献[10]相同.

本文选取  $|\{N_{m,p}(\mathbf{k})\}, \{N_{sp}(\mathbf{q})\}\rangle$  作为描述声子态的波矢, 其中  $\{N_{m,p}(\mathbf{k})\}$  和  $\{N_{sp}(\mathbf{q})\}$  分别表示一组 LO 和 SO 的声子数. 我们将  $a^+a$  和  $b^+b$  在声子态  $|\{N_{m,p}(\mathbf{k})\}, \{N_{sp}(\mathbf{q})\}\rangle$  内的期待值近似取为在温度  $T$  时的热平衡值<sup>[13]</sup>, 即

$$\begin{cases} N_1 = \langle a^+a \rangle = \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}; \\ N_2 = \langle b^+b \rangle = \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega_{sp}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}. \end{cases} \quad (4)$$

式中,  $k_B$  为玻尔兹曼常数.

$H^*(Z)$  在此声子态中的期待平均值可由下式直接求出

$$\bar{H}^* = \langle \{N_{m,p}(\mathbf{k})\}, \{N_{sp}(\mathbf{q})\} | H^* | \{N_{sp}(\mathbf{q})\}, \{N_{m,p}(\mathbf{k})\} \rangle. \quad (5)$$

仿照 LLP 的方法<sup>[11]</sup>, 注意到  $\mathbf{K}_l$  的方向是  $xy$  平面上唯一可优先选取的方向, 首先引入参数  $\eta_1$  和  $\eta_2$ , 令

$$\begin{cases} \sum_{k,m,p} |f_{m,p}(\mathbf{k})|^2 \mathbf{k} = \eta_1 \mathbf{K}_l; \\ \sum_{q,p} |g_p(\mathbf{q})|^2 \mathbf{q} = \eta_2 \mathbf{K}_l, \end{cases} \quad (6)$$

将式(6)代入式(5), 再由

$$\frac{\delta \bar{H}^*}{\delta f_{m,p}} = \frac{\delta \bar{H}^*}{\delta f_{m,p}^*} = \frac{\delta \bar{H}^*}{\delta g_p} = \frac{\delta \bar{H}^*}{\delta g_p^*} = 0$$

即可确定出变分参数:

$$f_{m,+}^* = i \frac{\left[ \frac{4\pi e^2}{V} \hbar\omega_{LO} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2} \cos\left(\frac{m\pi}{2d} Z\right)}{\left[ k^2 + \left( \frac{m\pi}{2d} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ \hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} (2N_1 + 1) - \frac{\hbar^2}{m^*} (1 - \eta_1) \mathbf{K}_l \cdot \mathbf{k} \right]} \quad (7a)$$

$$f_{m,-}^* = i \frac{\left[ \frac{4\pi e^2}{V} \hbar\omega_{LO} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi}{2d} Z\right)}{\left[ k^2 + \left( \frac{m\pi}{2d} \right)^2 \right]^{1/2} \left[ \hbar\omega_{LO} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} (2N_1 + 1) - \frac{\hbar^2}{m^*} (1 - \eta_1) \mathbf{K}_l \cdot \mathbf{k} \right]} \quad (7b)$$

$$g_+^* = i \frac{\left[ \frac{2\pi e^2}{A} \hbar\omega_{TO} (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \right]^{1/2} [\sinh(2gd)/q]^{1/2} e^{-8g} G_+}{\left[ \hbar\omega_{s+} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} (2N_{2+} + 1) - \frac{\hbar^2}{m^*} (1 - \eta_2) \mathbf{K}_l \cdot \mathbf{q} \right]} \quad (7c)$$

$$g_{\pm}^* = i \frac{\left[ \frac{2\pi e^2}{A} \hbar \omega_{\text{TO}} (\epsilon_0 - \epsilon_{\infty}) \right]^{1/2} [\sinh(2qd)/q]^{1/2} e^{-qd} G_{\pm}}{\left[ \hbar \omega_{s_{\pm}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} (2N_{2\pm} + 1) - \frac{\hbar^2}{m^*} (1 - \eta_2) \mathbf{K}_l \cdot \mathbf{q} \right]} \quad (7d)$$

式(7)中

$$\begin{cases} G_+ = \frac{\cosh(qZ)/\cosh(qd)}{(\epsilon_{\infty} + 1) - (\epsilon_{\infty} - 1)e^{-2qd}} \left[ \frac{(\epsilon_{\infty} + 1) - (\epsilon_{\infty} - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_0 + 1) - (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/4}; \\ G_- = \frac{\sinh(qZ)/\sinh(qd)}{(\epsilon_{\infty} + 1) + (\epsilon_{\infty} - 1)e^{-2qd}} \left[ \frac{(\epsilon_{\infty} + 1) + (\epsilon_{\infty} - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_0 + 1) + (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/4}; \end{cases} \quad (8)$$

式中  $\epsilon_0$  为静态介电常数;  $\epsilon_{\infty}$  为光学介电常数;  $A$  和  $V$  分别表示极性膜的表面积和体积;  $N_{2+}$  和  $N_{2-}$  则分别表示式(4)中当宇称  $P$  取“+”和“-”时  $\langle b^+ b \rangle$  的值;  $\omega_{\text{TO}}$  为横向光学声子的频率;  $\omega_{s_{\pm}}$  则表示  $P$  取“+”或“-”时,  $SO$  声子的频率, 它可以用  $\omega_{\text{TO}}$  表示为<sup>[12]</sup>

$$\omega_{s_{\pm}}^2 = \omega_{\text{TO}}^2 \frac{(\epsilon_0 + 1) \mp (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_{\infty} + 1) \mp (\epsilon_{\infty} - 1)e^{-2qd}}. \quad (9)$$

式(3)中, 其它变分参数  $f_{m_{\pm}}$  和  $g_{\pm}$  即是与式 7(a-d) 对应的共轭量。

对于慢电子, 可设  $\mathbf{K}_l \approx 0$ . 将式 7(a-d) 及其共轭式代入式(5), 并将有关公式展开至  $\mathbf{K}_l$  的一次项, 则得出  $\eta_1$  和  $\eta_2$  的近似表达式如下:

$$\eta_1 = \frac{\alpha F_B(Z)}{1 + \alpha F_B(Z)}; \quad (10)$$

其中  $F_B(Z) = \frac{8}{Nau_l} \left\{ \sum_{m=1,3,\dots}^{N/2} \cos^2 \left( \frac{m\pi}{2d} Z \right) I_m + \sum_{m=2,4,\dots}^{N/2} \sin^2 \left( \frac{m\pi}{2d} Z \right) I_m \right\};$

$$I_m = \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{[1 + (2N_1 + 1)x^2]^3 \left[ x^2 + \left( \frac{m\pi}{Nau_l} \right)^2 \right]};$$

$$\eta_2 = \frac{\alpha F_S(Z)}{1 + \alpha F_S(Z)}; \quad (11)$$

$$F_S(Z) = 4\epsilon_0^{1/2} \epsilon_{\infty}^{3/2} (Nau_l)^3 (I_{N+} + I_{N-});$$

$$I_{N+} = \int_0^{N\pi/2} \frac{x^3 e^{-x} \sinh x (G_+)^2 dx}{[(Nau_{S+})^2 + x^2 (2N_{2+} + 1)]^3};$$

$$I_{N-} = \int_0^{N\pi/2} \frac{x^3 e^{-x} \sinh x (G_-)^2 dx}{[(Nau_{S-})^2 + x^2 (2N_{2-} + 1)]^3};$$

式中,  $a$  是晶体晶格常数;  $N$  是以  $a$  为单位的膜的厚度, 即  $Na = 2d$ . 一维布里渊区边界条件限制了求和中  $m$  取值范围为  $1 \leq m \leq \frac{N}{2}$ .  $\alpha$  是电子与体 LO 声子间的耦合常数,  $u_l$  和  $u_{S\pm}$  表示极化子的波矢量, 它们分别定义为

$$\alpha = \frac{m^* e^2}{\hbar^2 u_l} \left( \frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right); \quad u_l = \left( \frac{2m^* \omega_{\text{LO}}}{\hbar} \right)^{1/2}; \quad u_{S\pm} = \left( \frac{2m^* \omega_{S\pm}}{\hbar} \right)^{1/2}. \quad (12)$$

在式(11)中定义变量  $x = 2qd$ .

将式(6)~(11)代入式(5), 得到的  $\bar{H}^*$  变分极小值即为极性膜内极化子在有限温度下的有效哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = \text{Min} \bar{H}^*$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} + \frac{\hbar^2 K_l^2}{2m^*} \left\{ 1 - \frac{\alpha F_B(Z)}{1 + \alpha F_B(Z)} - \frac{\alpha F_S(Z)}{1 + \alpha F_S(Z)} + \left[ \frac{\alpha F_B(Z)}{1 + \alpha F_B(Z)} \right]^2 \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ \frac{\alpha F_S(Z)}{1 + \alpha F_B(Z)} \right]^2 \Big\} + V_I^B(Z) + V_I^S(Z) + \sum_{k,m,p} N_1 \hbar \omega_{LO} + \sum_{q,p} N_2 \hbar \omega_{SP} \\
& + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ \left[ \sum_{k,m,p} N_1 k \right]^2 + \left[ \sum_{q,p} N_2 q \right]^2 \right\}; \quad (13)
\end{aligned}$$

式中,  $V_I^B(Z)$  和  $V_I^S(Z)$  分别表示由电子-体 LO 声子和电子-SO 声子相互作用诱生的有效势. 由上式第二项可定义出极化子的有效质量  $M^*$ , 考虑到  $\eta_1 \ll 1$  和  $\eta_2 \ll 1$ ,  $M^*$  可近似表示为

$$M^*(Z) = m^* [1 + \alpha F_B(Z) + \alpha F_S(Z)]. \quad (14)$$

为计算有效质量在  $Z$  方向上的平均值, 需求解电子在  $Z$  方向上的波函数. 为此将  $H_{\text{eff}}$  (13) 分写成两部分:

$$H_{\text{eff}} = H_Z + H_1;$$

其中,

$$H_Z = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} + V_I^B(Z) + V_I^S(Z),$$

而  $H_1$  则为式(13)中其余各项之和. 由于  $H_1$  内的  $M^*$  随  $Z$  的变化非常小, 因而电子在  $Z$  方向上的波函数可取为  $H_Z$  的本征函数. 由计算可知, 诸如 GaAs 等 III-V 族化合物的诱生势 ( $V_I(Z)$ ) 与电子在  $Z$  方向上的动能相比可以略而不计, 因此在假设膜表面势垒为无穷大的条件下, 电子在  $Z$  方向上的波函数即可取为无限深方势阱问题的解:

$$\varphi_l(Z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d}} \sin \frac{l\pi}{2d} (Z+d), & |Z| \leq d; \\ 0, & |Z| > d; \end{cases}$$

式中,  $l$  为量子数, 对于导电子其值受到  $l \leq N$  的限制. 有效质量  $M^*(Z)$  的平均值可表示为

$$\bar{M}^* = \langle \varphi_l(Z) | M^*(Z) | \varphi_l(Z) \rangle \approx m^* \{1 + \langle \alpha F_B(Z) \rangle + \langle \alpha F_S(Z) \rangle\}; \quad (15)$$

其中,

$$\langle \alpha F_B(Z) \rangle = \frac{4\alpha}{Nau_l} \left\{ \sum_{m=1}^{N/2} I_m + I_l \right\}; \quad (15a)$$

$$\begin{cases} I_m = \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{[1 + (2N_1 + 1)x^2]^3 \left[ x^2 + \left( \frac{m\pi}{Nau_l} \right)^2 \right]}; \\ I_l = I_m |_{m=l}; \end{cases} \quad (15b)$$

$$\begin{aligned}
\langle \alpha F_S(Z) \rangle &= 4\alpha \varepsilon_0^{1/2} \varepsilon_\infty^{3/2} (Nau_l)^3 \cdot (\langle I_{N+} \rangle + \langle I_{N-} \rangle); \\
\langle I_{N+} \rangle &= \frac{1}{2} \int_0^{N\pi/2} \frac{x^2 e^{-x} \sin hx}{[(Nau_{S+})^2 + (2N_{2+} + 1)x^2]^3 \cos^2 \frac{x}{2}} \\
&\quad \times \frac{1 + l^2 \pi^2 \sinh x/x / (x^2 + l^2 \pi^2)}{[(\varepsilon_\infty + 1) - (\varepsilon_\infty - 1)e^{-x}]^{3/2} [(\varepsilon_0 + 1) - (\varepsilon_0 - 1)e^{-x}]^{1/2}} dx; \\
\langle I_{N-} \rangle &= \frac{1}{2} \int_0^{N\pi/2} \frac{x^2 e^{-x} \sin hx}{[(Nau_{S-})^2 + (2N_{2-} + 1)x^2]^3 \sin^2 \frac{x}{2}} \\
&\quad \times \frac{l^2 \pi^2 \sinh x/x / (x^2 + l^2 \pi^2) - 1}{[(\varepsilon_\infty + 1) + (\varepsilon_\infty - 1)e^{-x}]^{3/2} [(\varepsilon_0 + 1) - (\varepsilon_0 - 1)e^{-x}]^{1/2}} dx.
\end{aligned}$$

### 3. 结果和讨论

以 GaAs 为例, 本文计算了不同温度下, 不同厚度的极性膜内极化子处于基态 ( $l=1$ ) 时

的有效质量. 在本文讨论的有限温度(低于室温)范围内, 晶体参数随温度的变化量很小<sup>[4]</sup>, 假设晶体参数近似为不变的常量, 计算中将其取为低温下的数值.

表 1 GaAs 晶体特性参量  
Table 1 Characteristic parameters of crystal GaAs.

$\epsilon_0$	$\epsilon_\infty$	$\hbar\omega_{LO}(\text{meV})$	$\hbar\omega_{TO}(\text{meV})$	$m^*/m_0$	$a(\text{nm})$	$\alpha$
12.83	10.90	36.70	33.83	0.0657	0.5654	0.0681

晶体常数  $\alpha$  取自文献[15]、其它参数取自文献[14]、 $m_0$  为自由电子的静止质量.

式(15)中,  $\langle\alpha F_B(Z)\rangle$  和  $\langle\alpha F_S(Z)\rangle$  分别来自电子与体 LO 声子和电子与 SO 声子的相互作用. 图 1 描述了它们随温度的变化特征. 比较对应不同厚度极性膜的曲线, 可以得知当膜很薄时 ( $N=4$ ), SO 声子的作用远大于 LO 声子的作用, 它是影响有效质量的主要因素. 但是, 随着膜厚的增加, 它会迅速减弱, 而 LO 声子的作用却随着膜厚的增大而逐渐增强; 在  $N \geq 50$  时, LO 声子作用成为决定有效质量的主要因素. 两种相互作用的影响都将随着温度的升高而减弱. 值得注意的是, 当  $N$  很小时, SO 声子的作用项 ( $\langle\alpha F_S\rangle$ ) 随温度的变化非常显著, 然而随着膜厚的增大这种变化迅速地减缓下来, 以致消失 ( $N > 50$  时); 而 LO 声子作用项 ( $\langle\alpha F_B\rangle$ ) 随温度的变化特征与膜厚的关系恰恰相反. 这表明在二维极限的情况下, 有效质量随温度的变化特征基本上完全取决于表面光学(SO)声子的作用.

图 2 给出有效质量 ( $\bar{M}^*/m_0$ ) 的温度变化曲线. 显然, 有效质量将随温度的升高而减小. 这是因为温度的升高使声子的非相关运动成为主要的形式, 电子运动与声子运动的相干作用减弱, 从而使有效质量减小. 而且在低温区 ( $T < 100\text{K}$ ) 这种变化非常平缓, 在较高的温度区域内 ( $100\text{K} < T < 250\text{K}$ ) 有效质量才表现出极其明显的变化.

图 3 绘出不同温度下, 有效质量与膜厚的关系曲线. 在任一确定的温度下, 当  $N$  趋于零时, SO 声子的作用使有效质量迅速增大. 当  $N$  增大时, SO 声子作用迅速减弱,  $\bar{M}^*$  也必然迅速减小. 随着  $N$  的继续增大, SO 声子作用消失, 有效质量则平缓地趋于由 LO 声子作

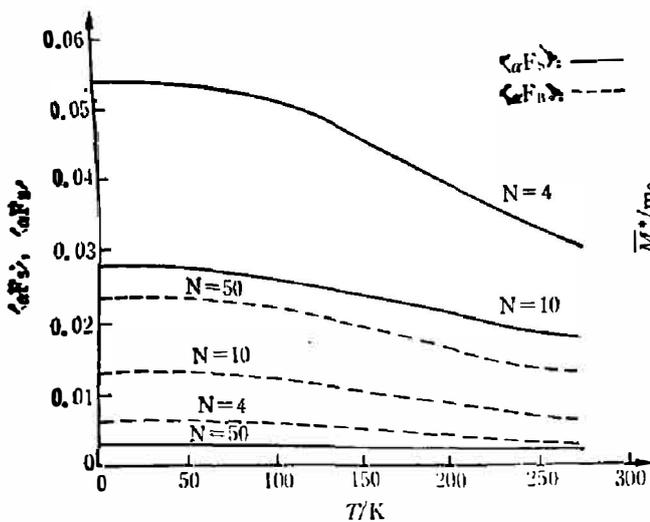


图 1 不同厚度极性膜内  $\langle\alpha F_B(Z)\rangle$  和  $\langle\alpha F_S(Z)\rangle$  与温度的关系曲线

Fig. 1  $\langle\alpha F_S\rangle$  and  $\langle\alpha F_B\rangle$  as functions of temperature  $T$  for different slab thickness  $N$ .

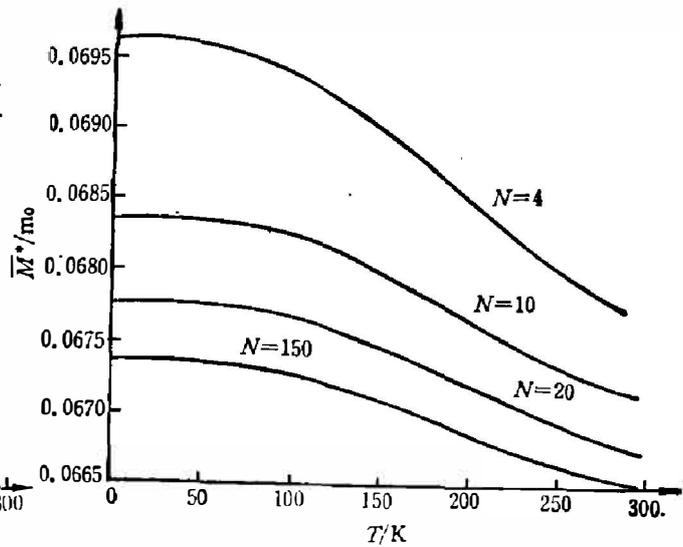


图 2 有效质量  $\bar{M}^*/m_0$  的温度变化曲线

Fig. 2 Temperature dependence of effective mass  $\bar{M}^*/m_0$ .

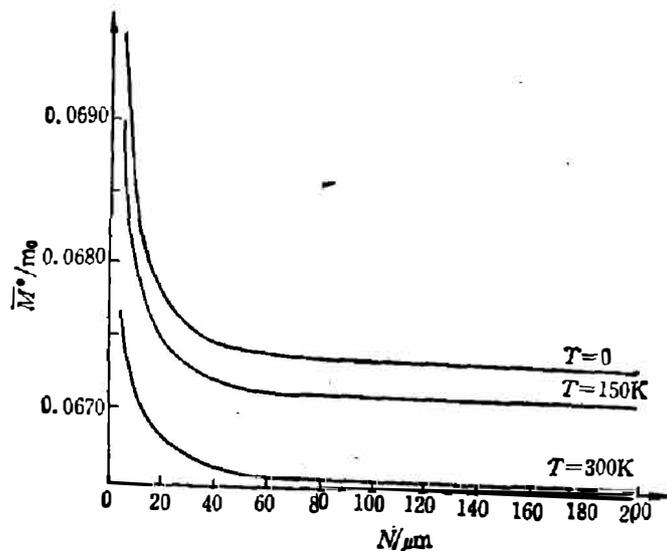


图 3 不同温度下有效质量随膜厚的变化曲线

Fig. 3 Effective mass  $\bar{M}^*/m_0$  vs the slab thickness  $N$  at different finite temperature.

用决定的稳定值。  $N$  很大时, 虽然 LO 声子作用是主要的, 但其随膜厚的变化极其微小, 因此, 当  $N \rightarrow \infty$  时,  $\bar{M}^*$  将趋于一稳定值。 另一方面, 温度越高, LO 声子的作用越弱, 所以在  $N \rightarrow \infty$  时有效质量的稳定值也就越低。

### 参 考 文 献

- [1] Saitoh M., *J. Phys. Soc. Jpn*, **49** (1980), 878~886.
- [2] Arisawa K. and Saitoh M., *Phys. Lett*, **82A** (1981), 462. *Phys. Status Solidi (b)*, **120** (1983), 361.
- [3] Peeters F. M. and Devreese J. T. *Phys. Rev.* **B25** (1982), 7302.
- [4] Fedyanin V. K. and Rodriguez O., *Phys. Status Solidi (b)*, **110** (1982), 105.
- [5] Peeters F. M. and Devreese J. T., *Phys. Rev.* **B31** (1985), 5500.
- [6] Osaka Y., *J. Phys. Soc. Jpn*, **21** (1966), 423.
- [7] Sarma Das, *Phys. Rev. Lett*, **52** (1984), 859.
- [8] Larsen D. M., *Phys. Rev.*, **B30** (1984), 4595.
- [9] Peeters F. M. and Devreese J. T., *Phys. Rev.*, **B31** (1985), 4890.
- [10] Gu S. W. and Shen M. Y., *Phys. Rev.* **B35** (1987), 9817.
- [11] Lee T. D. et al., *Phys. Rev.*, **90**(1953), 297.
- [12] Licari J. J. and Evrard, R., *Phys. Rev*, **B15**(1977), 2254.
- [13] Kazuo Hattori, *J. Phys. Soc. Jpn*, **38**(1975), 356.
- [14] Kartheuser E. *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*, edited by J. T. Devreese, North-Holland, Amsterdam, (1972), p. 727.
- [15] O'keefe M. and Hyde, B. G. *Acta Crystallogr. Sect*, **B34** (1978), 3519.

## EFFECTIVE MASS OF THE POLARON IN GaAs POLAR SLAB AT FINITE TEMPERATURE

LI YOUCHENG

*(Department of Physics, Hebei Normal University, Shijiazhuang Hebei, China)*

GU SHIWEI

*(Department of Applied Physics, Jiao Tong University, Shanghai, China)*

### ABSTRACT

With both the electron-LO phonon and the electron-SO phonon interaction included, the temperature dependence of the polaron's effective mass in a polar crystal slab is derived by means of Lee-Low-Pines variation method. Taking GaAs crystal as an example, the numerical calculation and discussion are made.