

⑫

384-388

极性晶体中表面极化子有效质量的磁场和温度依赖性*

额尔敦朝鲁 肖景林

(内蒙古民族师范学院物理系, 内蒙古通辽市, 028043)

0734

摘要 采用改进的线性组合算法讨论电子和体纵光学声子弱耦合、与表面声子耦合强时表面极化子有效质量的磁场和温度效应, 对 AgCl 晶体进行了数值计算结果表明, 极化子有效质量随温度的升高而减小, 随磁场的增大而增大。

关键词 表面极化子, 有效质量, 磁场, 温度效应。

极性晶体

引言

80年代报导了一些关于极化子有效质量温度依赖性的新的研究工作^[1,2], 在这些理论研究中, 由于采用不同的电子-声子相互作用机制和不同的理论近似, 提供了两种完全相反的结论. Yokota^[3]用 Hartree 近似得出极化子有效质量随温度的升高而减小, 而 Fulton^[4]利用 Gurari 变分法导出相反的结果. 通常, 晶体中的极化子质量是在弱磁场中的回旋共振实验中确定的. 对不同的物质, 实验结果也表明了相反的变化趋势.

70年代 Huybrechts^[5]提出了一种线性组合算符方法, Tokuda^[6]又在动量算符中引入了另一个变分参量, 在强、弱耦合情形下得到极化子的有效质量, 用此方法本文作者之一^[7]讨论了表面极化子的有效质量的温度依赖性. 有不少极性晶体, 电子与表面光学声子耦合强, 与体纵光学声子耦合弱^[7,8], 本文作者之一^[9]研究了这种晶体处于磁场中的性质, 但是它的磁场和温度效应至今还没有人研究过. 本文采用改进的线性组合算符法研究与表面光学声子耦合强、与体纵光学声子耦合弱的表面极化子有效质量的磁场和温度效应.

1 哈密顿量

假设在 $z > 0$ 的半无限空间里, 充满着极性晶体, $z < 0$ 的半无限空间里是真空, $x-y$ 平面是它们的交界面, 晶体内的电子在表面附近运动(距表面 $z > 0$). 稳恒磁场沿着 z 方向, 矢量用 $\vec{A} = B(-y/1, x/2, 0)$ 描写, 在磁场中电子-声子系的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon_\infty - 1)}{4z\epsilon_\infty(\epsilon_\infty + 1)} + \frac{1}{2m}(P_x - \frac{\beta^2}{4}y)^2 + \frac{1}{2m}(P_y + \frac{\beta^2}{4}x)^2 + \sum_{\vec{p}} \hbar\omega_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^\dagger a_{\vec{p}} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} + \sum_{\vec{p}} \frac{1}{W} \sin(W_z z) [V_{\vec{p}}^\dagger \exp(-i\vec{W}_{\parallel} \cdot \vec{p}) a_{\vec{p}}^\dagger + \text{H. C.}] + \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\sqrt{Q}} \exp(-Qz)$$

*中国科学院激发态物理开放研究实验室资助课题
稿件收到日期 1997-01-06, 修改稿收到日期 1997-02-25

$$\times [C^* \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{\rho}) b_{\vec{Q}}^\dagger + \text{H. C.}], \quad (1a)$$

$$V_{\vec{w}} = i \left(\frac{4\pi e^2 \hbar \omega_l}{\epsilon V} \right)^{1/2}, \quad C = i \left(\frac{\pi \hbar e^2 \omega_s}{\epsilon^* V} \right)^{1/2}, \quad (1b)$$

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}, \quad \frac{1}{\epsilon^*} = \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} - \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 1}, \quad \beta^2 = \frac{2eB}{c}. \quad (1c)$$

哈密顿量 H 中, 第一项是电子在 z 方向的功能, 第二项为镜像势, 第三项和第四项为电子在 x, y 方向的动能, 第五和第六项为体纵光学声子和表面光学声子的功能, 第七项和第八项为电子与体纵光学声子和表面光学声子相互作用的能量. ω_l 和 ω_s 是体纵光学声子和表面光学声子的频率, $a_{\vec{w}}$ 和 $a_{\vec{w}}^\dagger$ 分别是波矢为 \vec{w} 在 $(x-y)$ 平面内的分量 \vec{w}_\parallel 体纵光学声子的产生和湮灭算符, $b_{\vec{Q}}$ 和 $b_{\vec{Q}}^\dagger$ 分别是二维波矢为 \vec{Q} 的表面光学声子的产生和湮灭算符, \vec{P}_\parallel 和 $\vec{\rho}$ 分别是电子在平行于晶体表面的平面内运动的动量和坐标矢量, P_z 和 z 分别是电子在垂直于表面方向的动量和坐标, ϵ_0 (ϵ_∞) 是静态(高频)介电常数, S 和 V 是晶体的表面积和体积.

首先把哈密顿量分成平行于晶体表面的分量 H_\parallel 和垂直于晶体表面的分量 H_\perp 两部分

$$H = H_\perp + H_\parallel, \quad (2a)$$

$$H_\perp = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon_\infty - 1)}{4z\epsilon_\infty(\epsilon_\infty + 1)}. \quad (2b)$$

其余部分为 H_\parallel . 在绝热近似下, 处理 $x-y$ 平面内运动时, 将 z 看成参量. 对电子的横向运动的动量和坐标引进线性组合算符

$$P_{\parallel j} = \left(\frac{m \hbar \lambda}{2} \right)^{1/2} (b_j + b_j^\dagger + P_{\parallel j}), \quad \rho_j = i \left(\frac{\hbar}{2m\lambda} \right)^{1/2} (b_j - b_j^\dagger), \quad j = x, y. \quad (3)$$

系统的总动量为

$$\vec{P}_{\parallel T} = \vec{P}_\parallel + \sum_{\vec{w}} \hbar \vec{w}_\parallel a_{\vec{w}}^\dagger a_{\vec{w}} + \sum_{\vec{Q}} \hbar \vec{Q} b_{\vec{Q}}^\dagger b_{\vec{Q}}. \quad (4)$$

对 $H_\parallel - \vec{u} \cdot \vec{P}_{\parallel T}$ 作么正变换, 得

$$U_1 = \exp[-i(\sum_{\vec{w}} A_1 a_{\vec{w}}^\dagger a_{\vec{w}} \vec{w}_\parallel + \sum_{\vec{Q}} A_2 b_{\vec{Q}}^\dagger b_{\vec{Q}} \vec{Q}) \cdot \vec{\rho}], \quad (5a)$$

$$U_2 = \exp[\sum_{\vec{w}} (a_{\vec{w}}^\dagger f_{\vec{w}} - a_{\vec{w}} f_{\vec{w}}^\dagger) + \sum_{\vec{Q}} (b_{\vec{Q}}^\dagger g_{\vec{Q}} - b_{\vec{Q}} g_{\vec{Q}}^\dagger)]. \quad (5b)$$

对于我们讨论的与体声子弱耦合, 与表面声子强耦合情况, $A_1 = 1, A_2 = 0$. 选取有限温度下尝试波函数为

$$|\Phi\rangle = |\psi(z)\rangle |\{n_j\}\rangle |\{n_w\}\rangle |\{n_Q\}\rangle. \quad (6)$$

式中 $|\psi(z)\rangle$ 是描写电子 z 方向波函数, 其余部分分别表示极化子态, 体纵声子态和表面光学声子态. 其中 $\{n_j\}$ 表示极化子数, $\{n_w\}$ 表示体纵声子数, $\{n_Q\}$ 表示表面声子数. 计算

$$\langle \Phi | U_2^{-1} U_1^{-1} (H_\parallel - \vec{u} \cdot \vec{P}_{\parallel T}) U_1 U_2 | \Phi \rangle = \langle \psi(z) | F(\lambda, f_w, g_Q, \vec{u}, \vec{P}_0) | \psi(z) \rangle, \quad (7)$$

其中 $F(\lambda, f_w, g_Q, \vec{u}, \vec{P}_0)$ 称为变分参量函数. 利用变分技术可以求出变分参量 f_w (f_w^\dagger), g_Q (g_Q^\dagger), \vec{P}_0 和 λ , 将变分参量代入 F 中可得

$$F(\lambda, \vec{u}) = (n + \frac{1}{2})\hbar\lambda + \frac{\hbar\omega_c^2}{4\lambda}(n + \frac{1}{2}) + \sum_{\vec{w}} (\hbar\omega_l + \frac{\hbar^2 W_{\vec{w}}^2}{2m})n_w + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_s n_q - a_l \hbar\omega_l [\frac{\pi}{2} - K(z)] - a_s \hbar(\omega_s \lambda)^{\frac{1}{2}} M(z) - \frac{1}{2} m u^2 \left[\frac{1}{1 - (\pi/8)a_l + 2a_l L(z)} + 2a_s \left(\frac{\lambda}{\omega_s}\right)^{\frac{3}{2}} N(z) \right]. \quad (8a)$$

其中

$$K(z) = \int_0^{\infty} \frac{\exp(-2zu_l x)}{1+x^2} dx, \quad L(z) = \int_0^{\infty} \frac{x^2 \exp(-2zu_l x)}{(1+x^2)^3} dx, \quad (8b)$$

$$M(z) = \int_0^{\infty} (1-2nx^2) \exp(-x^2 - 2zu_l x) dx, \quad N(z) = \int_0^{\infty} x^2 \exp(-x^2 - 2zu_l x) dx, \quad (8c)$$

$$a_l = \frac{me^2}{\epsilon \hbar^2 u_l}, \quad a_s = \frac{me^2}{\epsilon^* \hbar^2 u_s}, \quad \omega_c = \frac{eB}{mc}, \quad u_l = \left(\frac{2m\omega_l}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad u_s = \left(\frac{2m\omega_s}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad u_\lambda = \left(\frac{2m\lambda}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (8d)$$

对平移速度慢的电子, u 很小, (8a) 的最后一项可以忽略, 因此, F 对 λ 的变分可得

$$\sqrt{\lambda} = a_s \sqrt{\omega_s} \int_0^{\infty} \frac{1-2nx^2}{(2n+1)(1-\omega_c^2/4\lambda^2)} (1-2zu_l x) e^{-x^2-2zu_l x} dx. \quad (9)$$

由式(9)可以看出, λ 值不仅与 n, B 有关, 而且与坐标 z 有关. 不难得出极化子的有效质量为

$$m^* = m \left[\frac{1}{1 - (\pi/8)a_l + 2a_l L(z)} + 2a_s \left(\frac{\lambda}{\omega_s}\right)^{\frac{3}{2}} N(z) \right]. \quad (10)$$

在有限温度下, 电子-声子系不再完全处于基态, 晶格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-声子系对各种状态的统计平均, 它们遵循玻色统计. 由此, 我们可以得到 λ 对 z, B 和 T 的关系, 由式(10)就可以得到极化子有效质量 m^*/m 与 z, B 和 T 的关系.

2. 结果与讨论

为了更清楚地说明表面极化子有效质量与磁场和温度的关系, 我们对表 1 列出的 AgCl 晶体的参数和耦合常数^[10]进行了数值计算.

表 1 AgCl 晶体的参数和耦合常数
Table 1 Parameters and coupling constant of AgCl crystal

ϵ_0	ϵ_∞	$\hbar\omega_l$ (meV)	$\hbar\omega_s$ (meV)	a_l	a_s
9.5	3.97	23.0	21.6	1.97	2.89

图 1 为 AgCl 晶体中表面极化子的有效质量在一定温度 ($T=80\text{K}$) 和不同磁场下与坐标 z 的关系曲线. 图 2 为 AgCl 晶体中表面极化子的有效质量在不同坐标下与温度 T 的关系曲线. 由图 1 和 2 可以看出, AgCl 晶体中的表面极化子的有效质量随温度 T (或坐标 z) 的增大而减小, 随磁场 B 的增大而增大. 由图 2 还可以看出, 当 $T < 80\text{K}$ 时, 表面极化子有效质量随温度的变化不明显, 但当 $T > 80\text{K}$ 时, 表面极化子有效质量随温度的变化非常明显.

由此可以看出, AgCl 晶体中表面磁场极化子有效质量随温度的升高而减小, 与 Yokota

所得结果一致,这是因为随着温度升高,晶格无规则运动增强,电子-声子之间相互作用减弱,从而使声子对电子的有效质量贡献减小.

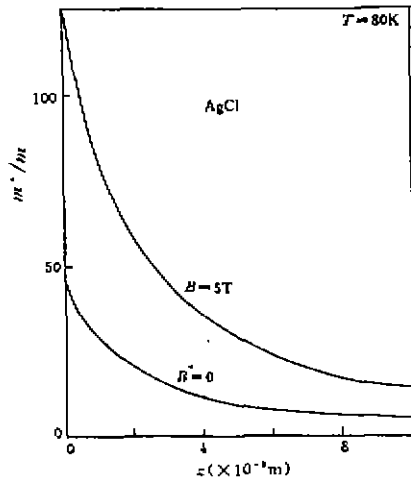


图 1 $T=80\text{K}$ 时极化子的有效质量在不同的磁场下与坐标 z 的关系

Fig. 1 The relationship between the effective mass of polaron and coordinate z at different magnetic field B at $T=80\text{K}$

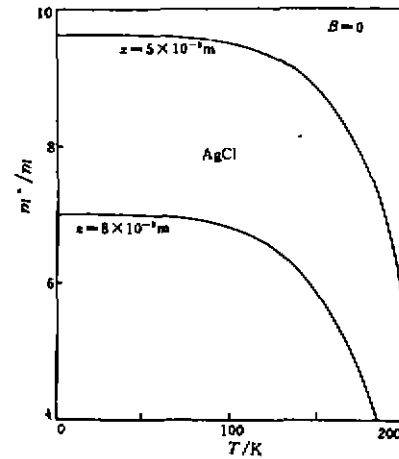


图 2 极化子的有效质量在不同坐标下与温度 T 的关系

Fig. 2 The relationship between the effective mass of polaron and temperature T at different coordinate z

REFERENCES

- 1 Saitoh M. *J. Phys. Soc. Japan*, 1980, **49**:878
- 2 Peeters F M, Devreese J T. *Phys. Rev. B*, 1982, **23**:7302; *Phys. Rev. B*, 1985, **31**:5300
- 3 Yokota T. *Busseiron Kenkyu*, 1953, **69**:137
- 4 Fulton T. *Phys. Rev.*, 1956, **103**:1712
- 5 Huybrechts J. *J. Phys.*, 1976, **C9**:L211
- 6 Tokuda N. *J. Phys.*, 1980, **C13**:L851
- 7 Sun B Q, Xiao W, Xiao J L. *J. Phys. Condens. Matter*, 1994, **6**:8167
- 8 肖玮,孙宝权,肖景林. *发光学报*(XIAO W, SUN B Q, XIAO J L. *Journal of Illumination*), 1993, **14**(2):253
- 9 Xiao W, Sun B Q, Xiao J L. *J. Phys. Condens. Matter*, 1996, **8**:535
- 10 Kartheuser E. *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*. (Amsterdam:North-Holland, 1972

MAGNETIC FIELD AND TEMPERATURE DEPENDENCE OF EFFECTIVE MASS OF THE SURFACE POLARON IN POLAR CRYSTALS*

EERDUNCHAOLU XIAO Jing-Lin

(Department of Physics, Inner Mongolia National Teachers' College, Tongliao Inner Mongolia 028043, China)

Abstract The magnetic field and temperature dependence of the effective mass of the surface polaron in polar crystals, which is a weak coupling with bulk longitudinal optical phonons and a strong coupling with surface longitudinal optical phonons, was discussed by using the improved linear combination operator method. Numerical calculations for AgCl crystal show that the effective mass of the surface polaron decreases with increasing temperature and increases with increasing magnetic field.

Key words surface polaron, effective mass, magnetic field, temperature dependence.

* The subject supported by the Laboratory of Excited State Processes, Chinese Academy of Sciences
Received 1997-01-06, revised 1997-02-25