

# 稳恒磁场中极性晶体膜内电子-表面声子 强耦合磁极化子的有效质量\*

额尔敦朝鲁<sup>1)</sup> 肖景林<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup> 内蒙古民族大学物理系, 内蒙古自治区, 通辽, 028043;

<sup>2)</sup> 中国科学院激发态物理开放研究实验室, 吉林, 长春, 120021)

**摘要** 采用 Tokuda 改进的线性组合算符、Lagrange 乘子和变分法, 讨论了磁场中极性晶体膜内电子-表面光学 (SO) 声子强耦合和电子-体纵光学 (LO) 声子弱耦合磁极化子的有效质量, 得出了磁极化子的有效质量随膜厚和磁场变化的规律, 对 KCl 极性晶体膜进行了数值计算, 结果表明磁极化子的有效质量随膜厚的增加而先减小后增加, 最后趋于一个稳定值, 随磁场的增加而增加。

**关键词** 极性晶体膜, 磁极化子, 有效质量。

## EFFECTIVE MASS OF THE ELECTRON-SURFACE PHONONS STRONG- COUPLING MAGNETOPOLARON IN A SLAB OF POLAR CRYSTAL WITHIN CONSTANT MAGNETIC FIELDS\*

Eerdunchaolu<sup>1)</sup> XIAO Jing-Lin<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup> Department of Physics, Inner Mongolia National University, Tongliao, Inner Mongolia 028043, China;

<sup>2)</sup> Laboratory of Excited State Processes, Chinese Academy of Sciences, Changchun, Jilin 120021, China)

**Abstract** The effective mass of the magnetopolaron in a slab of polar crystal within constant magnetic fields, which is a weak coupling of electron-bulk longitudinal optical (LO) phonons and strong coupling of electron-surface optical (SO) phonons, was discussed by using Tokuda's improved linear combination operator and the Lagrange multiplier and the variational method. The effective mass of the magnetopolaron was obtained as a function of the slab thickness and the magnetic fields. Numerical calculations for KCl polar crystal slab show that the effective mass of the magnetopolaron first decreases and then increases, finally tends to a stable value with increasing slab thickness, and increases with increasing magnetic fields.

**Key words** polar crystal slab, magnetopolaron, effective mass.

### 引言

随着研究对象向更小尺度和维度发展, 以及器件材料的多层膜化结构的趋势, 极性膜、量子阱和超晶格等微结构的研究引起了人们的极大兴趣和关注。

在极性膜的研究中, Licari 和 Evrard<sup>[1]</sup> 导出了包括电子与体纵光学 (LO) 声子、电子与表面光学 (SO) 声子相互作用的电子-声子相互作用体系的哈密顿量。随后, 许多学者<sup>[2-8]</sup> 对极性膜电子态的性质

进行了大量的研究。人们从仅考虑电子与 LO 声子相互作用<sup>[2-5]</sup>, 发展到不仅考虑电子与 LO 声子相互作用, 还要考虑电子与 SO 声子相互作用<sup>[6-8]</sup>, 逐步认识到电子-声子相互作用与极性膜的尺度密切相关 (量子限制效应), 也认识到电子与表面光学声子的相互作用对整个体系的性质有着重要影响 (极化子效应), 特别是薄膜的情况尤为重要。人们不仅考虑无外磁场的情况, 还研究了施加外磁场的情况<sup>[9-11]</sup>, 但所有以上这些对极性膜的研究大多都局限于电子-声子弱、中耦合的情形。

\* 中国科学院激发态物理开放研究实验室科学基金资助课题  
稿件收到日期 2000-06-19, 修改稿收到日期 2000-08-10

\* The project supported by the Laboratory of Excited State Physics, Chinese Academy of Sciences  
Received 2000-06-19, revised 2000-08-10

事实上不少极性晶体中电子与 LO 声子的耦合弱,与 SO 声子的耦合强<sup>[12~14]</sup>,目前人们对这类极性晶体膜的研究还甚少.本文作者<sup>[15]</sup>曾采用 Huybrechts 线性组合算法和变分法,讨论了极性晶体膜中电子与 SO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合极化子的自陷能.本文采用 Tokuda 改进的线性组合算法、Lagrange 乘子法、正则变换法和变分法相结合,研究了沿表面垂直方向施加磁场的极性晶体膜内电子与 SO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合磁极化子的有效质量,得出了磁极化子有效质量随膜厚和磁场变化的规律,对 KCl 材料进行数值计算,结果表明磁极化子有效质量随膜厚的增加先减小后增加,最后趋于一个稳定值,随外磁场的增加而增加,这表明外磁场将加强电子与声子的相互作用.

## 1 哈密顿量和变分计算

考虑一个厚度为  $2d$  的极性晶体膜,  $z$  轴垂直膜面,且有  $|z| \leq d$ ,如图 1 所示.沿  $z$  轴施加一稳恒磁场  $\vec{B} = (0, 0, B)$ . 参照文献[1],存在外磁场的情况下,电子-声子相互作用体系的哈密顿量可以写作<sup>[1]</sup>

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

其中

$$H_e = \frac{1}{2m_b} \left( p_x - \frac{\beta^2}{4} y \right)^2 + \frac{1}{2m_b} \left( p_y + \frac{\beta^2}{4} x \right) + \frac{p_z^2}{2m_b} + V(z), \quad (1b)$$

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq d \\ \infty, & |z| > d \end{cases} \quad (1c)$$

$$H_{ph} = H_{LO} + H_{SO} = \sum_{\vec{k}, m} \hbar \omega_{LO} a_m^+(\vec{k}) a_m(\vec{k}) + \sum_{\vec{q}, i} \hbar \omega_i b_i^+(\vec{q}) b_i(\vec{q}), \quad (1d)$$

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

$$H_{e-LO} = \sum_{\vec{k}, i} [V_{im}^*(\vec{k}, z) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} a_m^+(\vec{k}) + HC], \quad (1f)$$

$$H_{e-SO} = \sum_{\vec{q}, i} [V_i^*(\vec{q}, z) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} b_i^+(\vec{q}) + HC], \quad (1g)$$

$V_{im}^*(\vec{k}, z)$ ,  $V_i^*(\vec{q}, z)$ ,  $\omega_i$  等的意义与文献[15]相同.

为了求磁极化子的有效质量,按变分原理作一函数

$$\hat{J} = H - \vec{u} \cdot \vec{P}_{1T}, \quad (2)$$

其中

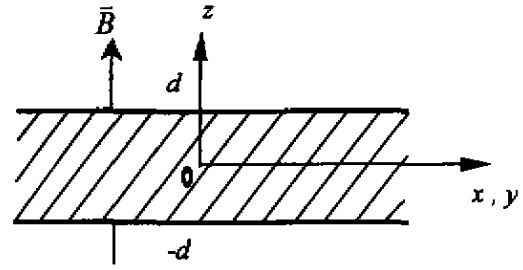


图 1 极化晶片的几何形状  
Fig. 1 Geometry of the polar crystal slab

$$\vec{P}_{1T} = \vec{P}_1 + \sum_{\vec{k}, m} \hbar \vec{k} a_m^+ u_m + \sum_{\vec{q}, i} \hbar \vec{q} a_i^+ a_i, \quad (3)$$

是系统的总动量算符,  $\vec{P}_{1T}$  是电子的动量算符,  $\vec{u}$  是 Lagrange 乘数因子,后面将看到它代表磁极化子的速度.

对电子  $x$ - $y$  方向运动的动量和坐标引进 Tokuda<sup>[16]</sup>改进的线性组合算符为

$$P_j = \left\{ \frac{m_b \hbar \lambda}{2} \right\}^{1/2} (B_j + B_j^- + p_{0j}),$$

$$\rho_j = i \left\{ \frac{\hbar}{2m_b \lambda} \right\}^{1/2} (B_j - B_j^-) \quad (j = x, y), \quad (4)$$

其中  $p_{0j}$  和  $\lambda$  为变分参量.

对式(2)作两次正则变换,有

$$J = U_2^{-1} U_1^{-1} J U_1 U_2$$

$$= U_2^{-1} U_1^{-1} (H - \vec{u} \vec{P}_{1T}) U_1 U_2, \quad (5a)$$

$$U_1 = \exp \left[ i \left( \sum_{\vec{k}, m} A_1 a_m^- a_m \vec{k} + \sum_{\vec{q}, i} A_2 b_i^+ b_i \vec{q} \right) \cdot \vec{\rho} \right], \quad (5b)$$

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_{\vec{k}, m} [f_m a_m^+(\vec{k}) + f_m^* a_m(\vec{k})] + \sum_{\vec{q}, i} [f_i b_i^+(\vec{q}) - f_i^* b_i(\vec{q})] \right\}. \quad (5c)$$

其中,  $f_m(k)$  [ $f_m^*(k)$ ] 和  $f_i(q)$  [ $f_i^*(q)$ ] 都是变分参数,  $A_i$  ( $i=1, 2$ ) 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 SO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合体系,  $A_1=1, A_2=0$ . 为了确定变分参数,先求  $J$  的期待值

$$\langle J \rangle = \langle \Psi_n | J | \Psi_n \rangle, \quad (6)$$

其中  $|\Psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle |0\rangle$  是  $T=0$  时变分波函数,  $|0\rangle$  是零声子态,  $|\varphi_n\rangle$  是电子态,满足

$$\left[ \frac{P_x^2}{2m_b} + V(z) \right] |\varphi_n(x)\rangle = \epsilon_n |\varphi_n(x)\rangle,$$

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} 0, & |x| > d \\ \frac{1}{\sqrt{d}} \sin\left[\frac{n\pi}{2d}(x+d)\right], & |x| \leq d \quad (\epsilon_n = \frac{\pi_0 \hbar^2}{8m_b d^2 n^2}, \\ & (n = 1, 2, 3, \dots)) \end{cases} \quad (7)$$

再求  $\langle J \rangle$  关于变分参量的极值, 可确定各变分参量  $\bar{P}_J, \lambda, f_m(k) [f_m^*(k)]$  和  $f_l(q) [f_l^*(q)]$ , 其中  $\lambda$  满足

$$\lambda = \left\{ \frac{\omega_c^2}{4} + \frac{a\hbar\omega_{LO}}{m_b d^3 u_l} \int_0^\infty dx x^2 e^{-2x} e^{-\frac{x^2}{2\pi_0 d^2 \lambda}} \left[ \frac{\pi^2 \sinh(2x)}{4x(4x^2 + \pi^2)} + 2 \right] \times \right. \\ \left. \left[ \frac{\operatorname{ctanh}(x)}{[(\epsilon_n + 1) + (\epsilon_n - 1)e^{-2x}]} (\epsilon_0 + 1)(\epsilon_0 - 1)e^{-2x} - \frac{\operatorname{tanh}(x)}{[(\epsilon_n + 1) - (\epsilon_n - 1)e^{-2x}]} (\epsilon_0 + 1) - (\epsilon_n - 1)e^{-2x} \right] \right\}^2, \\ \omega_c = \frac{eB}{m_b \mu} \quad (8)$$

$$\bar{p}_J = \frac{\sqrt{2m_b/(\hbar\lambda)} \bar{u}}{1 - \frac{4\alpha_l}{du_l} \left( \frac{3}{2} I_1 + \sum_{m=2,3,4,\dots} I_m \right)}, \\ \alpha_l = \frac{e^2 \bar{u}_l}{2\hbar\omega_{LO}} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (9)$$

$$I_m = \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{[x^2 + (m\pi/2du_l)^2][1+x^2]^3}, \\ \left\{ u_l = \left( \frac{2m_b \omega_{LO}}{\hbar} \right)^{1/2} \right\} \quad (10)$$

不难得出磁极化子动量的平均值为

$$\bar{P}_{1T} = \langle \varphi(x) | \langle 0 | U_2^{-1} U_1^{-1} \bar{P}_{1T} U_1 U_2 | 0 \rangle | \varphi(x) \rangle = m^* \bar{u}, \quad (11)$$

其中  $m^*$  是磁极化子的有效质量, 有

$$m^* = m_b \left\{ \frac{1}{1 - \frac{4\alpha_l}{du_l} \left( \frac{3}{2} I_1 + \sum_{m=2,3,4,\dots} I_m \right)} + \frac{8\alpha_l \epsilon_0}{d^3 u_l^{3/2} \epsilon_\infty} \int_0^\infty dx x^2 e^{-2x} e^{-\frac{x^2}{2\pi_0 d^2 \lambda}} \left[ \frac{\pi^2 \sinh(2x)}{4x(4x^2 + \pi^2)} + \frac{1}{2} \right] \times \right. \\ \left. \left[ \frac{\operatorname{ctanh}(x)}{[(\epsilon_n - 1) + (\epsilon_n - 1)e^{-2x}]^2} + \frac{\operatorname{tanh}(x)}{[(\epsilon_0 + 1) - (\epsilon_n - 1)e^{-2x}]^2} \right] \right\}. \quad (12)$$

从式(8)和(12)不难看出, 磁场中性极性晶体膜内磁极化子的有效质量由两部分组成: 一部分是由于电子-体 LO 声子相互作用所引起的极化子效应, 另一部分则是电子-SO 声子-磁场三体相互作用对有效质量的贡献. 很明显, 极化子的有效质量  $m^*/m_b$  与极

性晶体膜的厚度  $d$  和磁场强度  $B$  都有关.

## 2 数值分析与讨论

为了更清楚地说明极性晶体膜中各种声子模对电子性质的影响, 以及磁场和极性膜尺度对磁极化子有效质量的影响, 我们选择了具有较大电子-SO 声子耦合常数和较小电子-LO 声子耦合常数的 KC1 极性晶体膜材料进行数值计算, 材料参数为<sup>[17]</sup>  $\epsilon_0 = 4.49, \epsilon_\infty = 2.2, \hbar\omega_{LO} = 26.8 \text{ meV}, \alpha_l = 3.44, a_c = 4.04, m_b/m_e = 0.343, a = 3.15 \text{ \AA}$ . 数值结果见图 2.

数值结果表明, 不同支声子与电子相互作用对磁极化子有效质量的贡献大不相同, 两支表面光学声子 ( $\omega_+$  和  $\omega_-$ ) 与电子的耦合对磁极化子有效质量的贡献, 类似于它们对极化子自陷能的贡献<sup>[15]</sup>, 对称 ( $t=+$ ) 的表面光学声子与电子的相互作用对极化子有效质量的贡献可以忽略不计. 当膜厚较薄时, 电子-SO 声子耦合对极化子有效质量的贡献远大于电子-LO 声子耦合对有效质量的贡献. 图 2 给出了 KC1 极性晶体膜内磁极化子有效质量在不同的磁场下随膜厚的变化. 由图 2 可以看出, 在一定的磁场下, 磁极化子的有效质量  $m^*/m_b$  随膜厚  $d$  的增加先减小后增加. 当极性膜较薄 ( $d < 20 \text{ \AA}$ ) 时, 极化子的有效质量较大并随膜厚  $d$  的增加而迅速减小, 这是因为, 在薄膜情况下, 电子-SO 声子相互作用很强, 对极化子有效质量  $m^*/m_b$  的贡献是主要的. 当 20

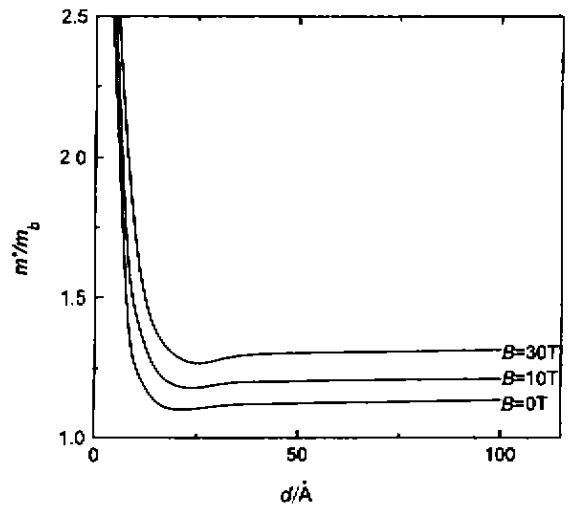


图 2 KC1 极性晶体膜中磁极化子的有效质量  $m^*/m_b$  在不同磁场  $B$  下随膜厚  $d$  的变化

Fig. 2 Variation of effective mass  $m^*/m_b$  of the magnetopolaron with the slab thickness  $d$  in the KC1 polar crystal slab at different magnetic fields  $B$

$\text{\AA} < d < 30 \text{\AA}$  时,  $m^*/m_0$  随膜厚  $d$  的增加由减小变为增加, 膜的厚度在此范围内时, 电子-SO 声子相互作用和电子-LO 声子相互作用对有效质量的贡献相当. 当  $d > 30 \text{\AA}$  以后, 有效质量  $m^*/m_0$  随膜厚  $d$  增加而增加, 这时变成电子-LO 声子相互作用对有效质量的贡献比电子-SO 声子相互作用的贡献大, 当  $d > 100 \text{\AA}$  时, 电子-LO 声子相互作用对有效质量的贡献变成主要的, 最后, 趋于一个稳定值. 由图 2 还可看出, 在膜厚一定的情况下, 极性膜中磁极化子的有效质量  $m^*/m_0$  随磁场强度  $B$  的增加而增加, 这说明, 外磁场将加强电子与声子的相互作用, 而且, 只对电子-SO 声子相互作用产生影响, 电子-LO 声子相互作用与外磁场无关.

### 3 结语

综上所述, 我们的研究表明, KCl 极性晶体膜中电子与不同支声子耦合强度及对磁场极化子有效质量的贡献大不相同. 在极性晶体膜较薄时, 电子与表面声子的耦合很强, 并且与宇称为负的表面声子耦合较与宇称为正的表面声子的耦合强得多, 后者在我们所研究的系统中可以忽略不计. 在极性晶体膜较厚的情况下, 电子与声子的耦合的贡献是主要的, 而表面声子的作用非常小. 因此, 在极性晶体膜结构中, 考虑表面声子的作用是非常必要的, 尤其是对那些电子与表面光学声子耦合强、与体纵光学声子耦合弱的极性晶体膜显得十分重要. 另外, 磁极化子的有效质量随外磁场的增加而增加, 这表明外磁场将加强电子与声子的相互作用.

### REFERENCES

- [1] Licari J J, Evrand R. Electron-phonons interaction in a dielectric slab; effects of the electronic polarizability, *Phys. Rev. B*, 1977, **15**: 2254
- [2] Licari J J. Polaron self-energy in a dielectric slab, *Solid State Commun.*, 1979, **29**: 625
- [3] Sherman A V. Dependence of the polaron binding energy and effective mass in a crystal layer on its thickness, *Solid State Commun.*, 1981, **39**: 273
- [4] Hawton M H, Paranjape V V. Polaron in thin slab, *Phys. Soc. Jap.*, 1983, **49**: 3563
- [5] Das Sarma S. The effective mass in GaAs heterostructure, *Phys. Rev. B*, 1983, **27**: 2590
- [6] Liang X X, Gu S W, Lin D L. Polaronic states in a slab of a polar crystal, *Phys. Rev. B*, 1986, **34**: 2807
- [7] Liang X X. Weak-coupling magnetopolaron in a slab of polar crystal, *Phys. Rev. B*, 1988, **38**: 3459
- [8] Ninno D, Iaboiisi G. Calculation of surface-polaron ground-state energy and effective potential, *Phys. Rev. B*, 1988, **38**: 3803
- [9] Peeters F M, Devreese J T. Statistical properties of polaron in a magnetic field I. Analytic results, *Phys. Rev. B*, 1982, **25**: 7281
- [10] Larsen D M. Perturbation theory for the two-dimensional polaron in a magnetic field, *Phys. Rev. B*, 1986, **33**: 799
- [11] Larsen D M. Upper bound to the polaron ground state in a magnetic field using the Feynman path-integral method, *Phys. Rev. B*, 1985, **32**: 2657
- [12] Xiao J L, Sun B Q, Xiao W. Temperature dependence of the interface polaron in polar crystals, *Phys. Stat. Sol(b)*, 1993, **176**: 117
- [13] Xiao W, Sun B Q, Xiao J L. Properties of the surface magnetopolaron in polar crystals, *J. Phys: Condensed Matter*, 1996, **8**: 535
- [14] Xiao J L, Xiao W. Influence of the interaction between phonons on the properties of the surface magnetopolaron in polar crystals, *Phys. Rev. B*, 1998, **58**: 1678
- [15] Eerdunchaolu, XIAO Jing-Lin. The self-trapping energy of the electron-surface phonon strong-coupling polaron in a slab of polar crystal, *Journal of Infrared and Millimeter Waves* (额尔敦朝鲁, 肖景林. 极性晶体膜中电子-表面声子强耦合极化子的自陷能, 红外与毫米波学报), 1999, **18**(6): 321
- [16] Tokuda N. A variational approach to the polaron problem, *J. Phys. C*, 1980, **13**: L211
- [17] Kartheuse E. *Polaron in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*. New York; North-Holland, 1972