

# 极性晶体膜中电子-表面声子强耦合极化子的自陷能\*

0471.4

额尔敦朝鲁<sup>1)</sup> 肖景林<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup>内蒙古民族师院物理系, 内蒙古自治区, 通辽市, 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 Huybrechts 线性组合算符和变分法相结合的方法, 研究了极性晶体膜内电子与体纵光学声子弱耦合、与表面光学声子强耦合系统的基态能量, 得到了作为膜厚和耦合常数函数的极化子的自陷能, 对 KCl 晶体进行了数值计算, 结果表明, 不同支声子与电子相互作用对极化子自陷能的贡献大不相同.

**关键词** 极性晶体膜, 极化子, 自陷能.

半导体  
LO 声子 SO 声子

## 引言

随着实验技术的发展和光学器件的广泛应用, 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.

在极性膜的研究工作中, 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 声子的相互作用<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), 特别是对薄膜的情况尤为重要. 但所有以上这些对极性膜的研究仅局限于电子-声子的弱、中耦合的情形.

事实上, 有不少极性晶体中电子与 LO 声子的耦合弱, 而与 SO 声子的耦合强<sup>[9~11]</sup>. 然而, 迄今为止, 人们对这类极性晶体膜还没有研究过. 本文采用 Huybrechts 线性组合算法和变分法, 讨论电子与 LO 声子耦合弱、与 SO 声子耦合强的极性晶体膜中电子-声子相互作用系统的基态能量, 得到了作为膜厚和耦合常数函数的极化子自陷能的表达式. 对 KCl 材料进行了数值计算, 结果表明, 不同支声子与电子相互作用对自陷能的贡献有很大区别, 进一步说明了极性膜中表面声子的重要性.

## 1 哈密顿量和变分计算

考虑一个被限制在厚度为  $2d$  的极性晶体膜中的电子, 如图 1 所示. 在有效带质量近似

\* 中国科学院激发态物理开放研究实验室和半导体超晶格国家重点实验室自然科学基金资助课题  
稿件收到日期 1998-09-01, 修改稿收到日期 1998-12-28

下,电子-声子相互作用系统的哈密顿量可以写作<sup>[1]</sup>

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

$$H_e = \frac{P^2}{2m_b} + V(z), \quad (1b)$$

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

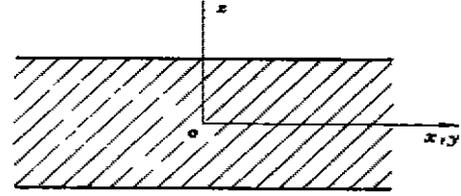


图1 极性晶体膜的几何形状  
Fig. 1 Geometry of the polar crystal slab

$$H_{ph} = \sum_{\vec{k}, m} \hbar \omega_{LO} a_m^+(\vec{k}) a_m(\vec{k}) + \sum_{\vec{q}, t} \hbar \omega_s b_t^+(\vec{q}) b_t(\vec{q}), \quad (1d)$$

$$H_{e-ph} = \sum_{\vec{k}, m} [V_m^*(k, z) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} a_m^+(\vec{k}) + HC] + \sum_{\vec{q}, t} [V_t^*(q, z) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{\rho}} b_t^+(\vec{q}) + HC], \quad (1e)$$

$$V_m^*(k, z) = \frac{B^*}{[k^2 + (\frac{m\pi}{2d})^2]^{1/2}} \times \begin{cases} \cos(\frac{m\pi}{2d}z), & t = +; m = 1, 3, 5, \dots, \\ \sin(\frac{m\pi}{2d}z), & t = -; m = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (1f)$$

$$V_t^*(q, z) = C^* \left[ \frac{\sinh(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-qd}$$

$$\times \begin{cases} \frac{\cosh(qz)/\cosh(qd)}{(\epsilon_\infty + 1) - (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}} \left[ \frac{(\epsilon_\infty + 1) - (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_0 + 1) - (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/4}, & t = + \\ \frac{\sinh(qz)/\sinh(qd)}{(\epsilon_\infty + 1) + (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}} \left[ \frac{(\epsilon_\infty + 1) + (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_0 - 1) + (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/4}, & t = - \end{cases} \quad (1g)$$

$$B^* = i0 \left[ \frac{4\pi e^2}{V} \hbar \omega_{LO} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2}, C^* = i \left[ \frac{2\pi e^2}{S} \hbar \omega_{TO} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \right]^{1/2}. \quad (1h)$$

$$\omega_{TO} = \sqrt{\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}} \omega_{LO}, \omega_{s\pm} = \sqrt{\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}} \omega_{LO} \left[ \frac{(\epsilon_\infty + 1) \mp (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_\infty + 1) \mp (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/2} \quad (1i)$$

式中,  $m_b$  是电子的有效带质量;  $\vec{K}_{LO} = (\vec{k}, k_z)$  为 LO 声子的波矢, 其中  $\vec{k} = k_x \vec{i} + k_y \vec{j}$ ,  $k_x = \frac{m\pi}{2d}$ ,  $m = 0, 1, 2, \dots, \frac{D}{2}$ ,  $D = \frac{2d}{a}$ ,  $a$  为晶格常数;  $\vec{q} = q_x \vec{i} + q_y \vec{j}$  为 SO 声子的波矢;  $\vec{r} = (\vec{\rho}, z)$ ,  $\vec{\rho} = x \vec{i} + y \vec{j}$  为电子位矢;  $t$  为  $z=0$  平面镜像对称的宇称, 取“+”或“-”,  $t$  取“+”时,  $m$  取奇数,  $t$  取“-”时,  $m$  取偶数;  $S$  和  $V$  分别表示极性膜的表面积和体积.

对电子的  $x-y$  方向运动的动量和坐标引进线性组合算符<sup>[10,11]</sup>, 并对哈密顿量  $H$  作两次么正变换

$$\mathcal{H} = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (2)$$

$$U_1 = \exp\left[i\left(\sum_{\vec{k}, m} A_1 a_m^+(\vec{k}) a_m(\vec{k}) \vec{k} + \sum_{\vec{q}} A_2 b_i + b_i(\vec{q}) \vec{q}\right) \cdot \vec{\rho}\right], \quad (3a)$$

$$U_2 = \exp\left\{\sum_{\vec{k}, m} [f_m(\vec{k}) a_m^+(\vec{k}) - f_m^*(\vec{k}) a_m(\vec{k})] + \sum_{\vec{q}} [f_i(\vec{q}) b_i^+(\vec{q}) - f_i^*(\vec{q}) b_i(\vec{q})]\right\} \quad (3b)$$

其中,  $\mathcal{H}_1$  是电子在反冲效应中发射和吸收不同波矢的声子之间相互作用所引起的附加能量, 可以忽略.  $f_m(\vec{k})$  [ $f_m^*(\vec{k})$ ] 和  $f_i(\vec{q})$  [ $f_i^*(\vec{q})$ ] 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, 对于我们讨论的电子与 LO 声子耦合弱及与 SO 声子耦合强的情形,  $A_1 = 1, A_2 = 0$ .

$T=0\text{K}$  时, 选基态波函数为  $|\psi_0\rangle = |\varphi(z)\rangle |0\rangle$ , 其中  $|0\rangle$  是零声子态,  $|\varphi(z)\rangle$  满足

$$\left[\frac{P_z^2}{2m_s} + V(z)\right] |\varphi(z)\rangle = \epsilon_n |\varphi(z)\rangle. \quad (4)$$

系统的有效哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{eff}(z) = \min[F(\lambda, z, f_m, f_i)]. \quad (5)$$

其中  $F(\lambda, z, f_m, f_i) = \langle 0 | \mathcal{H}_0 | 0 \rangle$  称为变分参量函数, 利用变分技术可以求出变分参量  $f_m^*$  ( $f_m$ ),  $f_i^*$  ( $f_i$ ), 将变分参量代入  $F$  中可得系统的基态能量的上限为

$$E_0 = \langle \varphi_1(z) | \mathcal{H}_{eff} | \varphi_1(z) \rangle = \epsilon_1 + \frac{\hbar \lambda}{2} - E_{tr}. \quad (6)$$

其中  $E_{tr}$  是电子的自陷能

$$E_{tr} = E_{tr-LO} + E_{tr-SO}, \quad (7)$$

$$E_{tr-LO} = \frac{a\hbar \omega_{LO}}{2d} \left(\frac{\hbar}{2m_s \omega_{LO}}\right)^{1/2} \left\{ \begin{array}{l} \frac{3/2}{1 - \frac{\pi^2 \hbar}{8d^2 m_s \omega_{LO}}} \ln\left(\frac{8d^2 m_s \omega_{LO}}{\pi^2 \hbar}\right) \\ + \sum_{m=2,3,4,\dots} \frac{1}{1 - \frac{m^2 \pi^2 \hbar}{8d^2 m_s \omega_{LO}}} \ln\left(\frac{8d^2 m_s \omega_{LO}}{m^2 \pi^2 \hbar}\right) \end{array} \right\}, \quad (8)$$

$$E_{tr-SO}(t) = \frac{a\hbar \omega_{LO}}{d} \left(\frac{\hbar}{2m_s \omega_{LO}}\right)^{1/2} \int_0^\infty dx e^{-2x} e^{-\frac{x^2}{2m_s d^2}} \left[ \frac{\pi^2 \sin \hbar(2x)}{x(4x^2 + \pi^2)} + 2 \right] \\ \times \left\{ \begin{array}{l} \frac{\tanh(x)}{[(\epsilon_\infty + 1) - (\epsilon_\infty - 1)e^{-2x}][(\epsilon_0 + 1) - (\epsilon_0 - 1)e^{-2x}]}, \quad t = + \\ \frac{c \tanh(x)}{[(\epsilon_\infty + 1) + (\epsilon_\infty - 1)e^{-2x}][(\epsilon_0 + 1) + (\epsilon_0 - 1)e^{-2x}]}, \quad t = - \end{array} \right. \quad (9)$$

这里  $a = \frac{e^2}{2\hbar \omega_{LO}} \left(\frac{2m_s \omega_{LO}}{\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)$  为电子和 LO 声子的耦合常数. 式(6)中的参数  $\lambda$  由  $E_0$  对  $\lambda$  的极小值确定.

从式(7)~(9)不难看出, 极化子的自陷能由两部分组成: 一部分是由于电子-体 LO 声子相互作用所引起的极子效应, 另一部分是电子-SO 声子相互作用引起的. 后者又包含两部

分,分别是电子与极性膜中两支表面声子相互作用的贡献.

## 2 数值分析及讨论

为了清楚地说明极性膜中各种光学极化模对电子性质的影响(极化子效应),我们具体以 KCl 极性晶体膜为例,进行数值计算.计算所采用的材料参数<sup>[12]</sup>为; $\epsilon_0=4.49$ , $\epsilon_\infty=2.2$ , $\hbar\omega_{LO}=26.8\text{meV}$ , $\alpha=3.44$ , $m/m_b=0.343$ , $a=3.15\text{\AA}$ ,数值结果分别示于图 2 和 3 中.

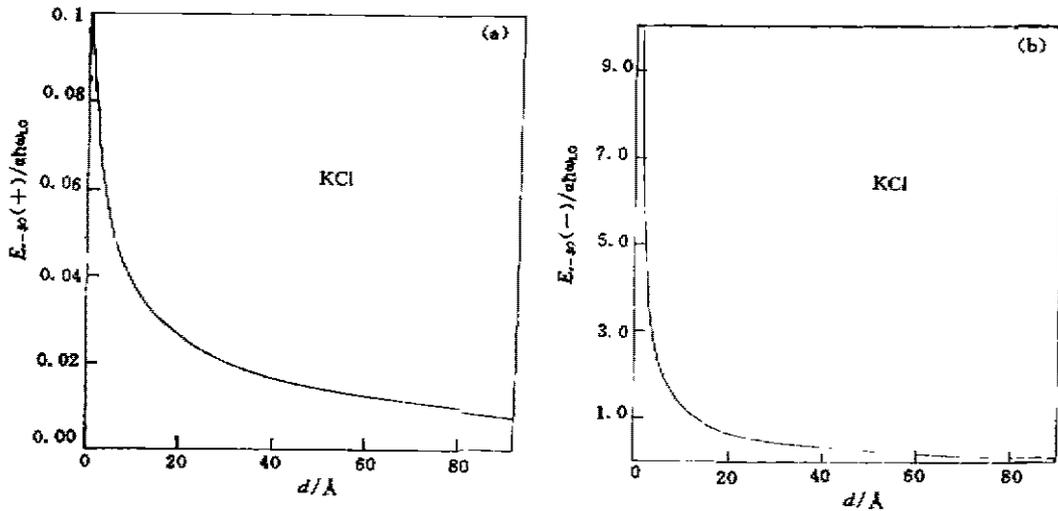


图 2 KCl 极性晶体膜中极化子自陷能  $E_{e-so}(t)$  随膜厚  $d$  的变化  
Fig. 2 Variation of self-trapping energy  $E_{e-so}(t)$  of the polaron with the slab thickness  $d$  in the KCl polar crystal slab

在图 2(a)和(b)中,分别描绘了 KCl 极性晶体膜中由于电子-表面光学声子相互作用所产生的极化子自陷能  $E_{e-so}(+)$  和  $E_{e-so}(-)$  随膜厚  $d$  的变化.由图中不难看出, $E_{e-so}(+)$  和  $E_{e-so}(-)$  随膜厚  $d$  的增加而减小,且两支表面光学声子( $\omega_{s+}$  和  $\omega_{s-}$ )与电子的耦合程度是大不相同的.对称( $t=+$ )的表面光学声子-电子相互作用很弱,所产生的自陷能  $E_{e-so}(+)$  很小,而反对称( $t=-$ )的表面光学声子-电子相互作用则很强,所产生的自陷能  $E_{e-so}(-)$  比  $E_{e-so}(+)$  大两个数量级.因此,对称的表面光学声子-电子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-so}(+)$  是可以忽略的.

图 3 表示了 KCl 极性晶体膜中电子-体 LO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-LO}$ 、电子-SO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-SO}$  和总自陷能  $E_p$  随膜厚  $d$  的变化曲线.由图可以看出, $E_{e-LO}$  随膜厚  $d$  的增加而增大, $E_{e-SO}$  随膜厚  $d$  的增加而减小.当极性膜较薄时,电子-SO 声子的相互作用是主要的,随着膜厚  $d$  的增加, $E_{e-SO}$  迅速下降,当  $d > 100\text{\AA}$  以后,几乎趋于零.电子-LO 声子相互作用产生的自陷能  $E_{e-LO}$ ,随着膜厚  $d$  的增加而逐渐增大,最后当膜厚足够大时趋于一定值.当  $d < 20\text{\AA}$  时,总自陷能  $E_p$  随膜厚的增加而迅速减小.这是因为膜的厚度在此范围内时,电子-SO 声子相互作用是主要的.当  $20\text{\AA} < d < 30\text{\AA}$  时, $E_p$  随膜厚  $d$

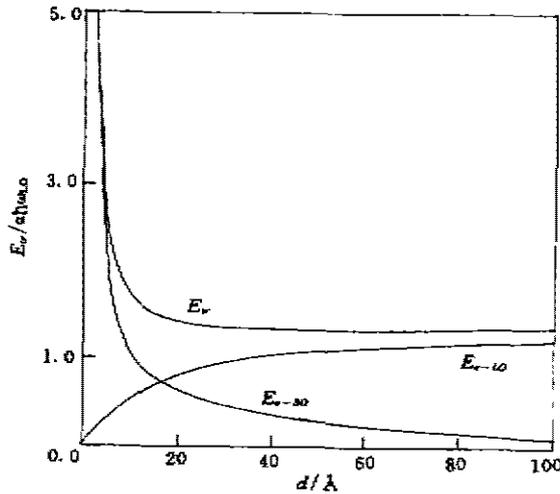


图3 自陷能  $E_{e-lo}$ 、 $E_{e-so}$  和  $E_p$  随膜厚  $d$  的变化  
Fig. 3 Variation of self-trapping energy  $E_{e-lo}$ ,  
 $E_{e-so}$  and  $E_p$  with the slab thickness  $d$

的增加略有减小,膜的厚度在此范围内时,电子-SO声子和电子-LO声子相互作用对自陷能的贡献差别不大.当膜的厚度  $d > 30 \text{ \AA}$  时,自陷能  $E_p$  趋于一定值,这时电子-LO声子相互作用对自陷能的贡献比电子-SO声子的相互作用的贡献逐渐加大,当  $d > 80 \text{ \AA}$  时,电子-LO声子相互作用对自陷能的贡献是主要的.

通过以上结果,我们进一步看到极性膜的尺度和表面光学声子作用的重要性,特别是对那些电子与表面光学声子耦合强、与体光学声子耦合弱的极性晶体膜是尤为重要的.

#### REFERENCES

- 1 Licari J J, Evrand R. Electron-phonon interaction in a dielectric slab: effects of the electronic polarizability, *Rhys. Rev.*, 1977, **B15**: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 a thin slab, *Phys. Soc. Jap.*, 1983, **49**:3563
- 5 Das Sarma S. The effective mass in GaAs heterostructure, *Phys. Rev.*, 1983, **B27**:2590
- 6 Liang X X, Gu S W, Lin D L. Polaronic states in a slab of a polar crystal, *Phys. Rev.*, 1986, **B34**:2807
- 7 Liang X X. Weak-coupling magnetopolarons in a slab of a polar crystal, *Phys. Rev.*, 1988, **B38**:3459
- 8 Ninno D, Iadonisi G. Calculation of surface-polaron ground-state energy and effective potential, *Phys. Rev.*, 1988, **B38**:3803
- 9 Wei B H, Liu Y Y, Gu S W, et al. Effective mass of the surface polaron at a finite temperature, *Phys. Rev.*, 1992, **B46**:4269
- 10 Sun B Q, Xiao W, Xiao J L. Properties of the surface magnetopolaron in polar crystals, *J. Phys: Condens. Matter.*, 1994, **6**:8167
- 11 Xiao W, Sun B Q, Xiao J L. Influence of the interaction between phonons on the properties of the surface magnetopolaron in polar crystals, *J. Phys: Condens. Matter.*, 1996, **8**:535
- 12 Kartheuser. *E. Polaron in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*, Amsterdam: North-Holland, 1972

**THE SELF-TRAPPING ENERGY OF THE ELECTRON-SURFACE  
PHONON STRONG-COUPPLING POLARON  
IN A SLAB OF POLAR CRYSTAL\***

EER Dun-Chaolu<sup>1)</sup> XIAO Jing-Lin<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup>Department of Physics, Inner Mongolia National Teacher's College, Tongliao, Inner Mongolia 028043, China;

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

**Abstract** The ground state energy of the strong coupling of electron-surface optical phonons system with weak coupling of electron-bulk longitudinal optical phonons in a slab of polar crystal was studied by using Huybrecht's linear combination operator and variational method. The self-trapping energy of the polaron was obtained as functions of the slab thickness and the coupling constants. Numerical calculations for KCl crystal show that the contributions of interaction between the electron and the different branch of phonons to the self-trapping energy are greatly different.

**Key words** polar crystal slab, polaron, self-trapping energy.

---

\* The project supported by the Laboratory of Excited State Physics, Chinese Academy of Sciences and by the National Laboratory of Semiconductor superlattices of China  
Received 1998-09-01, revised 1998-12-20