第20卷第1期
2001年2月

红外与毫米波学报
J. Infrared Millim. Waves

Vol. 20, No. 1
February, 2001

声学形变势表面极化子的温度效应*

赵翠兰　肖景林
(内蒙古民族大学物理系，内蒙古自治区，通辽，028043)

摘要　采用线性组合算符方法，研究与表面光学声子耦合强、与表面声学声子耦合弱的声学形变势表面极化子的温度效应. 对KI晶体的数值计算结果表明：振动频率、有效质量随温度的升高而减少，而诱生势随温度的升高而增大.

关键词　表面极化子，声学形变势，温度效应.

TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE ACOUSTIC DEFORMATION POTENTIAL SURFACE POLARON*

ZHAO Cui-Lan　XIAO Jing-Lin
(Department of Physics, Inner Mongolia National University, Tongliao, Inner Mongolia Autonomous Region 028043, China)

Abstract　The temperature characteristic of the acoustic deformation potential surface polaron in polar crystal, which has a weak coupling with surface phonons and a strong coupling with surface optical phonons was studied by using linear-combination-operator method. Numerical calculation for KI crystal as an example, illustrated that the vibration frequency λ and effective mass m_s^* of the acoustic deformation potential surface polaron decrease with increasing temperature, but the induced potential V_i^* of the acoustic deformation potential surface polaron will increase with increasing temperature.

Key words　surface polaron, acoustic deformation potential, temperature dependence.

引言

对于极性晶体、极性半导体中表面极化子的性质，人们进行了大量的研究工作. 在这些工作中，声子对电子性质的影响是一个重要课题，已引起人们的广泛关注. Sak[1]和Evans[2]对极性晶体的表面极化子作了理论研究，并研究了体纵光学声子对表面极化子的影响. 顾世洧[3,4]等人对半无限晶体中弱、中耦合以及强耦合进行了详尽讨论. 本文作者[5,6]曾研究了极性晶体、极性半导体中形变势的表面极化子、表面磁极化子的性质. 但这些工作均是在低温(零度)下讨论的. 事实上，有限温度的情形更有意义.

一些关于极化子质量温度效应的研究表明，由于采用不同的电子-声子相互作用机制的假设和不同的理论方法，将提供两种完全相反的结论. Saiton[7]用费曼路径积分得出极化子质量随温度升高而减少，但是顾世洧[8]却得到相反的结果. 目前，实验上已证明这两种情况都是存在的.

由于固体中声学振动的近似线性的色散关系，使它与光学振动相比，有许多独特的性质. 电子和表面声子的相互作用，对了解晶体中低能电子的非弹性散射是极为重要的. 在不少的极性晶体中，电子与SO声子耦合强，而与SA声子耦合弱，到目前为止，对这种形变势极化子性质的研究还仅限于零度的情形. 本文采用线性组合算符方法，研究与SO声子耦合强、与SA声子耦合弱的声学形变势表面极化子的温度效应.

1　哈密顿量

设晶体表面位于 x-y 平面内，表面法线沿 z 轴，在 $z>0$ 的半无限空间里充满着极性晶体. 晶体内的电子在表面附近运动(距表面 $z>0$). 电子-声子系

* 内蒙古自然科学基金(编号99009)资助项目
稿件收到日期2000-09-11，修改稿收到日期2000-11-14

* The project supported by the Natural Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region of China (No. 99009)
Received 2000-09-11, revised 2000-11-14

的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{P_{/\!/}^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon_\infty - 1)}{4z\epsilon_\infty(\epsilon_\infty + 1)} + \sum_Q \hbar\,\omega_s a_Q^+ a_Q + \sum_Q \hbar\,\omega_Q b_Q^+ b_Q + \sum_Q e^{-Qz}(V_Q^* a_Q^+ e^{-iQ\cdot\vec{\rho}} + h\cdot c) + \sum_Q \Gamma e^{-\eta Qz}(b_Q^+ e^{-iQ\cdot\vec{\rho}} + h\cdot c). \tag{1}$$

式中各量的物理意义与文献[5]相同. 将哈密顿量分为两部分，即

$$H = H_{/\!/} + H_\perp, \tag{2a}$$

其中

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

其余部分为 $H_{/\!/}$. 设电子在 z 方向的运动是缓慢的，于是确定电子在 x-y 平面内的运动时可将 z 方向的动量、坐标视为参量. 对 x-y 平面内的运动引进两次幺正变换

$$U_1 = \exp[-i(\sum_Q A_1 a_Q^+ a_Q + \sum_Q A_2 b_Q^+ b_Q)\vec{\rho}],$$
$$U_2 = \exp[\sum_Q (a_Q^+ f_Q - a_Q f_Q^*)] + \sum_Q (b_Q^+ g_Q - b_Q g_Q^*). \tag{3}$$

其中 $A_i(i=1,2)$ 是表征耦合强度的参量，$A_i=1$ 对应于弱耦合，$A_i=0$ 对应于强耦合，本文讨论 $A_1=0$、$A_2=1$ 的情形. $f_Q(f_Q^*)$、$g_Q(g_Q^*)$ 为变分参量. 对电子横向运动的动量和坐标引进线性组合算符

$$P_{/\!/j} = \left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(B_j + B_j^+ + P_{0j}),$$
$$\rho_j = i\left(\frac{\hbar}{2m\lambda}\right)^{\frac{1}{2}}(B_j - B_j^+). \quad (j = x, y) \tag{4}$$

其中 λ 和 P_{0j} 是变分量. 由于系统的总动量

$$\vec{P}_{/\!/T} = \vec{P}_{/\!/} + \sum_Q \hbar_Q a_Q^+ a_Q + \sum_Q \hbar_Q b_Q^+ b_Q \tag{5}$$

与哈密顿量对易，所以其本征值为一守恒量. 下面对 $H = H_{/\!/} - \vec{u}\cdot\vec{P}_{/\!/T}$ 作两次幺正变换：

$$H = U_2^{-1}U_1^{-1}(H_{/\!/} - \vec{u}\cdot\vec{P}_{/\!/T})U_1U_2, \tag{6}$$

在有限温度下，选尝试波函数为

$$|\varphi\rangle = |\varphi(z)\rangle|\{n_j\}\rangle|\{n_a\}\rangle|\{n_b\}\rangle. \tag{7}$$

其中 $|\varphi(z)\rangle$ 是描写电子 z 方向的波函数，$\{n_j\}$ 表示极化子数，$\{n_a\}$ 表示 SO 声子数，$\{n_b\}$ 表示 SA 声子数. 式(6)对 $|\varphi\rangle$ 的期待值为

$$\langle\varphi|H|\varphi\rangle = \langle\varphi(z)|F(\lambda, f_Q, g_Q, u, P_0)|\varphi(z)\rangle. \tag{8}$$

在计算过程中，我们利用了电子在空间运动的对称性，设 $n_x=n_y=n$，忽略波矢的高阶小量和双声子过程. F 对 f_Q、g_Q 和 P_0 变分可得

$$F(\lambda, u) = (n + \frac{1}{2}\hbar\lambda + \sum_Q(\frac{\hbar^2Q^2}{2m} + \hbar\,\omega_Q)n_b + \sum_Q \hbar\,\omega_s n_a - \alpha'_a\frac{\hbar^2}{4m}f_1(z) - \alpha_s\hbar\,\omega_s(\frac{\lambda}{\omega_s})^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}x e^{-2u_\lambda zx - x^2}(1 - 2nx^2) - \frac{1}{2}mu^2[\frac{1}{1-\alpha'_a f_2(z)} + 2\alpha_s(\frac{\lambda}{\omega_s})^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}x \times (1-2nx^2)x^2e^{-2u_\lambda zx - x^2}]. \tag{9}$$

其中

$$\alpha'_a = \alpha_a\frac{8mV_R}{3\hbar\,u_s}, Q_0 = \frac{mV_R}{\hbar}, \tag{10a}$$

$$\alpha_a = E_d^2(1-\eta^2)^2\frac{3mu_s}{4\pi k\rho_0 V_R\hbar^2}, \tag{10b}$$

$$f_1(z) = \int_0^{Q_m} dQ\,\frac{Q^2e^{-2\eta Q}z}{(Q+2Q_0)}, \tag{10c}$$

$$f_2(z) = \int_0^{Q_m} dQ\,\frac{Q^2e^{-2\eta Q}z}{(Q+2Q_0)}. \tag{10d}$$

对于平移速度慢的电子，将含 u^2 的项忽略，F 对 λ 变分得

$$\sqrt{\lambda} = \alpha_s\sqrt{\omega_s}\int_0^\infty dx\,\frac{1-2nx^2}{2n+1} \times (1 - 2u_\lambda zx)e^{-2u_\lambda zx - x^2}. \tag{11}$$

不难看出声学形变势表面极化子动量的平均值为

$$\overline{P} = \langle\{n_b\}|\langle\{n_a\}|\langle\{n_j\}|U_2^{-1}U_1^{-1}P_{/\!/}U_1U_2|\{n_j\}\rangle|\{n_a\}\rangle|\{n_b\}\rangle = mu[\frac{1}{1-\alpha'_a f_2(z)} + 2\alpha_s(\frac{\lambda}{\omega_s})^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}x \times (1-2nx^2)x^2e^{-2u_\lambda zx - x^2}]. \tag{12}$$

可见，u 就是声学形变势表面极化子在 x-y 平面内的平均速度，而声学形变势表面极化子的有效质量为

$$m^* = m\frac{1}{1-\alpha'_a f_2(z)} + 2\alpha_s(\frac{\lambda}{\omega_s})^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}x e^{-2u_\lambda zx - x^2} \times (1-2nx^2)x^2 = m_1^* + m_2^*. \tag{13a}$$

其中

$$m_1^* = \frac{m}{1-\alpha'_a f_2(z)}, \tag{13b}$$

其余为 m_2^*. 最后得声学形变势表面极化子的有效哈密顿为

$$H_{eff}=\frac{P_{z}^{2}}{2m}+\frac{P_{//}^{2}}{2m^{*}}+\frac{e^{2}(\epsilon_{\infty}-1)}{4\pi\epsilon_{\infty}(\epsilon_{\infty}+1)}+(n+\frac{1}{2})\hbar\lambda+\sum_{Q}(\frac{\hbar^{2}Q^{2}}{2m}+\hbar\omega_{Q})n_{b}+\sum_{Q}\hbar\omega_{s}n_{a}-\frac{\alpha'_{a}\hbar}{4m}f_{1}(z)-\alpha_{s}\hbar\omega_{s}(\frac{\lambda}{\omega_{s}})^{\frac{1}{2}}\int_{0}^{\infty}dx(1-2nx^{2})e^{-2u_{s}zx-x^{2}}. \quad (14)$$

2　极化子的温度效应

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，根据量子统计学

$$\bar{n}=[\exp(\frac{\hbar\lambda}{k_BT})-1]^{-1},$$

$$\bar{n}_a=[\exp(\frac{\hbar\omega_s}{k_BT})-1]^{-1}, \quad (15)$$

$$\bar{n}_b=[\exp(\frac{\hbar\omega_Q}{k_BT})-1]^{-1}.$$

其中 K_B 是玻尔兹曼常数. 由式(11)看出，λ 不仅与 n 有关，而且与坐标 z 有关，还必须与式(15)自恰. 将式(15)代入式(11)可得到 λ 对 z 和 T 的关系. 而声学形变势表面极化子的有效哈密顿量为

$$H_{eff}=\frac{P_{z}^{2}}{2m}+\frac{P_{//}^{2}}{2m^{*}}+(n+\frac{1}{2})\hbar\lambda+\sum_{Q}(\hbar\omega_{Q})n_{a}+\sum_{Q}(\frac{\hbar^{2}Q^{2}}{2m}+\hbar\omega_{Q})n_{b}+V_{img}+V_{i}^{a}+V_{i}^{b}. \quad (16a)$$

其中

$$V_{img}=\frac{e^{2}(\epsilon_{\infty}-1)}{4\pi\epsilon_{\infty}(\epsilon_{\infty}+1)}, \quad (16b)$$

$$V_{i}^{b}=-\frac{\alpha'_{a}\hbar}{4m}f_{1}(z), \quad (16c)$$

$$V_{i}^{a}=-\alpha_{s}\hbar\omega_{s}(\frac{\lambda}{\omega_{s}})^{\frac{1}{2}}\int_{0}^{\infty}dx(1-2nx^{2})e^{-2u_{s}zx-x^{2}}. \quad (16d)$$

分别是像势、电子-SA 声子相互作用所产生的诱生势和电子-SO 声子相互作用所产生的诱生势.

3　结果和讨论

由式(13)可知，只有 m_{2}^{*} 与温度有关，所以，在讨论 m^{*} 与 T 的依赖关系时，只须讨论 m_{2}^{*} 随 T 的变化规律. 同样，有效势的温度效应取决于 V_{i}^{a} 与 T 的关系. 为了清楚地看出表面极化子的温度效应，我们以极性晶体 KI 为例进行了数值计算，KI 晶体 有关参数如表 1[9].

表 1　KI 晶体的参数和耦合常数

Table 1　Parameters and coupling constants of KI crystal

ϵ_0	ϵ_∞	$\hbar\omega_s(meV)$	α_s
4.68	2.68	18.0	3.10

图 1～3 分别表示 KI 晶体的声学形变势表面极化子的振动频率、有效质量 m_{2}^{*}、诱生势 V_{i}^{a} 在不同的温度下和坐标 z 的关系曲线，其中实线表示 $T=$

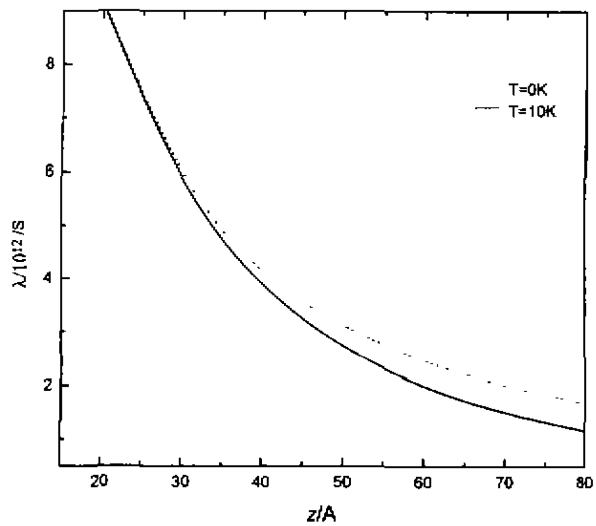

图 1　不同的温度下 λ 对 z 的关系曲线

Fig. 1 λ as a function of z at different temperature

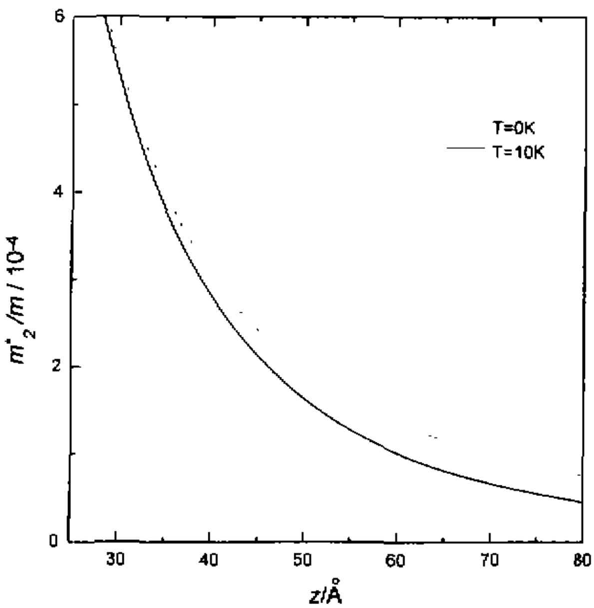

图 2　不同温度下 m_{2}^{*}/m 对 z 的关系曲线

Fig. 2 m_{2}^{*}/m as a function of z at different temperature

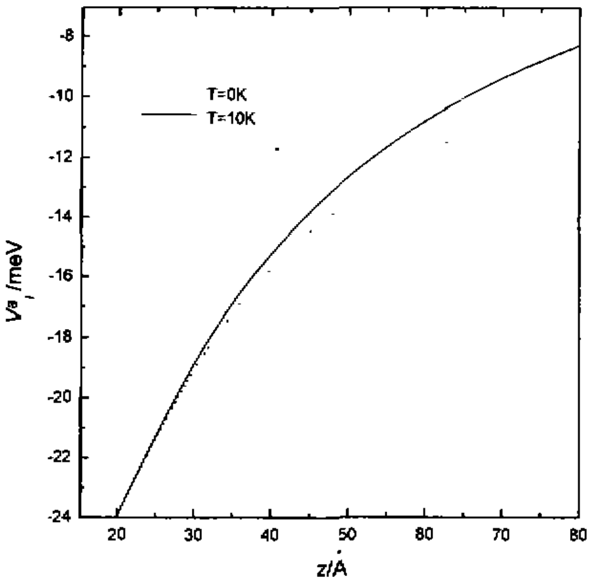

图 3 不同温度下 V_i^a 对 z 的关系曲线

Fig. 3 V_i^a as a function of z at different temperature

10K，虚线表示 $T=0$K. 由图 1 看到，振动频率 λ 随坐标 z(T 给定时)的增大而减小，随温度 T(z 给定时)的升高而降低，且温度愈高，降低的愈多. 由图 2 看出，有效质量 m_z^* 随坐标 z(或温度 T)的增大而减小，且温度 T(z 给定时)愈高，m_z^* 下降的愈多. 这一结果与 Saiton 的结果相同. 而由图 3 看出，诱生势 V_i^a 随坐标 z(或温度 T)的增大而增加，说明离晶体表面愈远(或温度愈高)，声学形变势表面极化子的势阱愈浅.

REFERENCES

[1]Sak J. Theory of surface polarons, *Phys. Rev. B*, 1972, **6**: 3981—3986

[2]Evans E, Mills D L. Interaction of slow electrons with the surface of a model dielectric: theory of surface polarons, *Phys. Rev. B*, 1973, **8**: 4004—4018

[3]Liang X X, Gu S W. The polarons and their dead layers in semi-infinite polar crystals, *Solid State Commun.*, 1984, **50**: 505—508

[4]Gu S W, Zhang J. Note on strong coupling polarons in a semi-infinite ionic crystal, *Phys. Stat. Sol.*, 1984, **121**: k165—170

[5]ZHAO Cui-Lan, WANG Zi-An, XIAO Jing-Lin. Surface polaron of interaction with the deformation potential in polar crystals, *Chinese Jouranl of Luminescence* (赵翠兰，王小安，肖景林. 极性晶体中与形变势相互作用的表面极化子，光学学报), 1998, **19**(1): 1—7

[6]ZHAO Cui-Lan, DING Zhao-Hua, XIAO Jing-Lin. Properties of the surface magnetopolaron potential in polar semiconductors, *Journal of Optoelectronics and Laser* (赵翠兰，丁朝华，肖景林. 极性半导体中经由形变势的表面磁极化子的性质，光电子学报), 1999, **10**(1): 78—82

[7]Saiton M. Theory of a polaron at finite temperatures, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1980, **49**: 878—886

[8]Gu S W. The temperature dependence of the polaron effective mass, *Chin. Phys.*, 1981, **1**: 84

[9]Kartheuser E. *Dielectric Properties of Polar Crystals. Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors.* Antwerp Advanced Study Institute 1871 on Frohlich Polarons and Electron-Phonon Interaction in Polar Semiconductors, New York: North-Holland, 1972: 721