

## 晶格热振动对磁场中半无限极性晶体内 表面磁极化子自陷能的影响<sup>\*</sup>

额尔敦朝鲁 肖景林

(内蒙古民族大学, 内蒙古通辽市, 028043)

**摘要** 采用 Huybrechts 的线性组合算符法和变分法, 研究了晶格热振动对磁场中半无限极性晶体内电子与表面光学(SO)声子强耦合、与体纵光学(LO)声子弱耦合体系的影响, 得到了作为距离晶体表面的深度、磁场和温度函数的表面磁极化子的自陷能. 对 AgCl 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表面磁极化子自陷能的贡献以及它们随距离晶体表面的深度、磁场和温度变化的情况大不相同.

**关键词** 表面磁极化子, 自陷能, 磁场和温度依赖性.

## EFFECT OF THERMAL LATTICE VIBRATION ON SELF-TRAPPING ENERGY OF THE SURFACE MAGNETOPOLARON IN SEMI-INFINITE POLAR CRYSTAL WITHIN THE MAGNETIC FIELD<sup>\*</sup>

BAO Eerdunchaolu XIAO Jing-Lin

(Inner Mongolia University for Nationalities, Tongliao, Inner Mongolia 028043, China)

**Abstract** The effect of thermal lattice vibration on the system in semi-infinite polar crystal within the magnetic field, which is weak coupling with bulk LO phonons and strong coupling with SO phonons, were studied. An expressions for the self-trapping energy of the surface magnetopolaron as a function of the depth from the crystal surface, magnetic field and temperature were derived by using Huybrechts' linear combination operator and variational method. The numerical results of the self-trapping energy for AgCl show that the contribution of interaction between the electron and the different branch of phonons to the self-trapping energy and the it's changing with the depth from the crystal surface, magnetic field and temperature are greatly different.

**Key words** surface magnetopolaron, self-trapping energy, magnetic field and temperature dependence.

### 引言

在超晶格和量子阱异质结构中, 表面或界面的性质对整个体系有着重要的影响, 它们所具有的一些性质也包含了复杂结构的某些重要内容现象. 所以, 研究表面或界面附近电子的状态和性质, 对进一步研究超晶格和量子阱异质结等复杂结构有着深远的意义和用途.

表面磁极化子因其在磁光技术中的重要作用而引起国内外学者的广泛重视. Wu 等<sup>[1]</sup>用 Feynman 路径积分方法研究了 Fröhlich 光学二维磁极化子基

态能量, Larsen<sup>[2]</sup>采用四级微扰法计算了磁场中二维极化子的基态能量, Wei 等<sup>[3,4]</sup>利用格林函数方法研究和体纵光学(LO)声子、交界面光学(IO)声子相互作用的交界面磁极化子的诱生势和自能, 但这项工作大多数都只是限于零温极限和电子-声子弱、中耦合情形.

对于体极化子, 弱、中耦合理论适用于电子-体 LO 声子耦合常数  $\gamma_1$  小于 6 的情形<sup>[5]</sup>, 而对于表面极化子这种限制约为 2.5<sup>[6]</sup>, 所以当电子与表面光学(SO)声子的耦合常数  $\gamma_s$  大于 2.5 时, 就必须采用强耦合理论. 事实上, 有不少的极性晶体中, 电子与

\* 内蒙古自然科学基金(批准号 99009)资助项目  
稿件收到日期 2002-05-27, 修改稿收到日期 2002-07-01

\* The project supported by the National Natural Science Foundation of Nei Monggol (No. 99009)  
Received 2002-05-27, revised 2002-07-01

表面 SO 声子的耦合强,而与体 LO 声子的耦合弱<sup>[7]</sup>.然而,迄今为止,人们对这些材料中局域电子态性质的研究甚少.

20 世纪 70 年代, Huybrechts<sup>[8]</sup>提出了一种线性组合算符方法,将强耦合极化子描写为在抛物势阱中谐振动的准粒子. Tokuda<sup>[9]</sup>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.我们用此方法<sup>[10,11]</sup>讨论了极性晶体中与表面 SO 声子耦合强、与体 LO 声子耦合弱的表面磁极化子有效质量的磁场和温度依赖性.本文采用 Huybrechts 的线性组合算符法和变分法研究了晶格热振动对磁场中半无限极性晶体内电子与表面 SO 声子强耦合、与体 LO 声子弱耦合体系的影响,得到了作为距离晶体表面的深度、外磁场和温度函数的表面磁极化子的自陷能.对 AgCl 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表面磁极化子自陷能的贡献以及它们随距离晶体表面的深度、外磁场和温度的变化情况大不相同.

### 1 哈密顿量与变分计算

设晶体表面位于 x-y 平面内,表面法线方向在 z 轴下,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),电子处于一个沿着 z 方向的稳恒磁场 B = (0, 0, B) 中,如图 1 所示.在磁场中电子-声子系的哈密顿量可以写成<sup>[10,11]</sup>

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{1}{2m} P_x^2 + \frac{1}{4} \frac{y^2}{z} + \frac{1}{2m} P_y^2 + \frac{1}{4} \frac{x^2}{z} + \frac{P_z^2}{2m} \\
 & + \frac{e^2(\epsilon_0 - 1)}{4z(\epsilon_0 + 1)} + \sum_w \cdot a_w^\dagger a_w + \sum_Q \cdot b_Q^\dagger b_Q \\
 & + \sum_w \frac{1}{W} \sin(W_z Z) V_w \exp(-iW \cdot r) a_w^\dagger + HC \\
 & + \sum_Q \frac{1}{Q} \exp(-Qz) C^* \exp(-iQ \cdot r) b_Q^\dagger + HC.
 \end{aligned}
 \tag{1a}$$

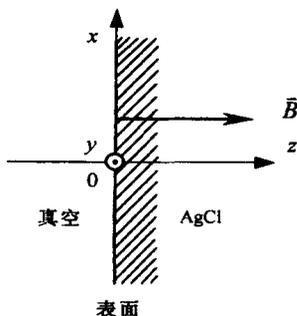


图 1 半无限极性晶体的几何形状

Fig. 1 Geomtry of the semi infinite polar crystal

其中

$$\begin{aligned}
 V_w^* &= i \frac{4e^2 \cdot \epsilon_0^{-1/2}}{S}, \\
 C^* &= i \frac{e^2 \cdot \epsilon_0^{-1/2}}{S}, \\
 \frac{1}{z} &= \frac{1}{z_0} - \frac{1}{z_1}, \\
 \frac{1}{z^*} &= \frac{0 - 1}{0 + 1} - \frac{-1}{+1}, \\
 \epsilon_0 &= \frac{1}{2} \left( \epsilon_T + \epsilon_L \right), \\
 \epsilon_0^{-1/2} &= \frac{2eB}{c}.
 \end{aligned}
 \tag{1b}$$

哈密顿量 H 中,第一、二和三项分别表示电子在 x, y 和 z 方向的动能,第四项为镜像势,第五和第六项为体 LO 声子和表面 SO 声子的动能,第七和第八项为电子与体 LO 声子和表面 SO 声子相互作用的能量.  $\omega_l$  和  $\omega_s$  是体 LO 声子和表面 SO 声子频率,  $a_w^\dagger$  和  $a_w$  分别是波矢为 w (在 x-y 平面内的分量为  $w$ ) 的体 LO 声子的产生和湮灭算符,  $b_Q^\dagger$  和  $b_Q$  分别是二维波矢为 Q 的表面 SO 声子的产生和湮灭算符,  $P_x, P_y$  和  $P_z$  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,  $P_z$  和  $z$  分别是电子在垂直于晶体表面方向运动的动量和坐标,  $\epsilon_0(\infty)$  是静态(高频)介电常数, S 和 V 是晶体的表面积和体积.

首先,把哈密顿量分成两部分,即

$$H = H_1 + H_2,
 \tag{2a}$$

$$H_2 = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon_0 - 1)}{4z(\epsilon_0 + 1)}.
 \tag{2b}$$

其余部分为  $H_1$ ,在绝热近似下,处理 x-y 平面内运动时,将 z 看成参量.对于电子的横向运动的动量和坐标引进线性组合算符<sup>[8]</sup>,并对  $H_1$  作两次么正交变,得

$$\begin{aligned}
 U_1 = & \exp \left[ -i \sum_w A_1 a_w^\dagger a_w W + \sum_Q A_2 b_Q^\dagger b_Q Q \right],
 \end{aligned}
 \tag{3a}$$

$$\begin{aligned}
 U_2 = & \exp \left[ \sum_w (a_w^\dagger f_w - a_w f_w^*) + \sum_Q (b_Q^\dagger g_Q - b_Q g_Q^*) \right].
 \end{aligned}
 \tag{3b}$$

其中  $f_w(f_w^*)$  和  $g_Q(g_Q^*)$  都是变分参数,  $A_i (i = 1, 2)$  是表征电子-声子耦合强度的参量,对于我们讨论的电子与体 LO 声子耦合弱,与表面 SO 声子耦合强的情况<sup>[8]</sup>,  $A_1 = 1$  和  $A_2 = 0$ . 选取有限温度下的尝试

波函数为

$$|\psi\rangle = |\psi(z)\rangle | \{n_j\} \rangle | \{n_w\} \rangle | \{n_Q\} \rangle, \quad (4)$$

$|\psi(z)\rangle$  是描写电子  $z$  方向运动的波函数,  $| \{n_j\} \rangle$  表示极化子态,  $| \{n_w\} \rangle$  和  $| \{n_Q\} \rangle$  分别表示体 LO 声子态和表面 SO 声子态, 其中  $\{n_j\}$  表示极化子数,  $\{n_w\}$  和  $\{n_Q\}$  分别表示体 LO 声子数和表面 SO 声子数. 计算

$$| U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 | \psi\rangle = (z) | F(f_w, g_Q, z, B) | \psi(z). \quad (5)$$

式中  $F$  称为变分参量函数, 求  $F$  关于变分参量的极值, 可确定各变分参量, 并将它们代入  $F$  中, 可得到

$$F = \sum_w \epsilon_w n_w + \sum_Q \epsilon_Q n_Q - E_{e-ph}^{tr}. \quad (6a)$$

其中  $E_{e-ph}^{tr}$  是表面磁极化子的自陷能, 具体表达式为

$$E_{e-ph}^{tr} = E_{e-LO}^{tr} + E_{e-SO}^{tr}, \quad (6b)$$

$$E_{e-LO}^{tr} = \frac{1}{2} \frac{1}{2n_w + 1} \int_0^\infty \psi^2(x) dx, \quad (6c)$$

$$E_{e-SO}^{tr} = \frac{1}{2} \frac{1}{2n_Q + 1} \int_0^\infty \psi^2(x) dx + \frac{1}{4} \frac{1}{2n_Q + 1} \int_0^\infty \psi^2(x) dx, \quad (6d)$$

$$\psi(z) = \int_0^\infty \frac{\exp(-2u_1zx)}{1+x^2(2n_w+1)} dx,$$

$$\psi(z) = \int_0^\infty (1-2nx^2) \exp(-x^2-2u_1zx) dx,$$

$$1 = \frac{me^2}{2u_1}, \quad \epsilon_s = \frac{me^2}{2u_s}, \quad \epsilon_c = \frac{eB}{mc},$$

$$u_1 = \frac{2m_1}{\hbar}^{1/2}, \quad u_s = \frac{2m_s}{\hbar}^{1/2}, \quad u = \frac{2m}{\hbar}^{1/2}. \quad (6e)$$

由此可见, 表面磁极化子的自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  由两部分组成, 一部分是电子体 LO 声子相互作用产生的自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$ , 另一部分则来自电子-表面 SO 声子相互作用对自陷能的贡献  $E_{e-SO}^{tr}$ .

### 2 磁场和温度依赖性

在有限温度下, 电子-声子系不完全处于基态, 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-声子系各种状态的统计平均, 它们遵循玻色统计. 由式(6)可以得到磁极化子的自陷能与  $z$ 、 $B$  和  $T$  的关系.

### 3 结果与讨论

为了更清楚地说明表面磁极化子的自陷能与磁

场和温度的依赖关系, 我们以 AgCl 晶体为例进行数值计算, 材料参数为<sup>[12]</sup>:  $\epsilon_0 = 9.5$ ,  $\epsilon_\infty = 3.97$ ,  $\epsilon_1 = 23.0 \text{ meV}$ ,  $\epsilon_s = 21.6 \text{ meV}$ ,  $\epsilon_1 = 1.97$ ,  $\epsilon_s = 2.89$ , 数值结果分别示于图 2~5.

图 2 为在外磁场  $B = 10 \text{ T}$  时, AgCl 晶体中电子与体 LO 声子和表面 SO 声子相互作用对表面磁极化子自陷能的贡献  $E_{e-LO}^{tr}$  和  $E_{e-SO}^{tr}$  在不同温度  $T$  下随距离晶体表面深度  $z$  的变化关系. 图 2 表明, 电子与体 LO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$  随距离晶体表面的深度  $z$  的增加而增加并最后趋于一定值, 而电子与表面 SO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-SO}^{tr}$  在表面附近很大但随距离晶体表面深度  $z$  的增加而迅速减小, 最后趋于零. 从图不难看出, 自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$  和  $E_{e-SO}^{tr}$  随温度  $T$  的升高而减小, 这是因为随着温度的升高, 晶格的无规则运动加剧, 电子-声子相互作用减弱, 从而使极化子的自陷减弱. 从图 2 还可以看出, 当  $T < 80 \text{ K}$  时,  $E_{e-LO}^{tr}$  和  $E_{e-SO}^{tr}$  随温度  $T$  的变化不明显, 但当  $T > 80 \text{ K}$  时, 它们随温度  $T$  的变化非常明显, 而且  $E_{e-LO}^{tr}$  随温度  $T$  的变化要比  $E_{e-SO}^{tr}$  明显得多.

图 3 表示在温度一定 ( $T = 80 \text{ K}$ ) 时, AgCl 晶体中电子与体 LO 声子和表面 SO 声子相互作用对表面磁极化子自陷能的贡献  $E_{e-LO}^{tr}$  和  $E_{e-SO}^{tr}$  在不同磁

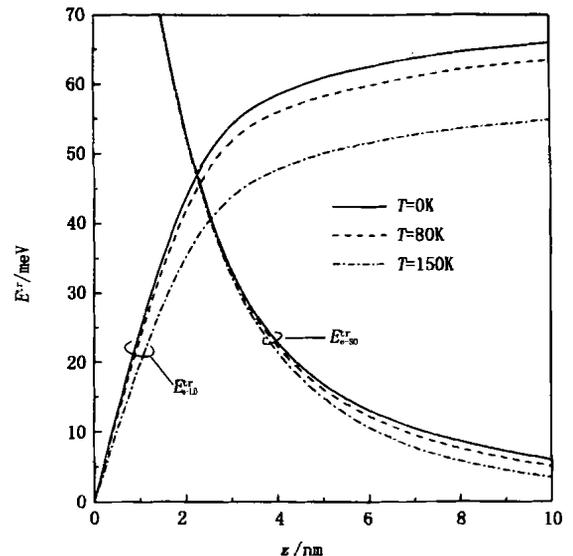


图 2 在  $B = 10 \text{ T}$  时, 电子与 LO 声子和 SO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$  和  $E_{e-SO}^{tr}$  在不同温度  $T$  下随距离晶体表面的深度  $z$  的变化关系  
Fig. 2 The relationship between the self-trapping energy  $E_{e-LO}^{tr}$  and  $E_{e-SO}^{tr}$ , induced the interaction of the electron with both LO phonon and SO phonon, and the depth from the crystal surface  $z$  at different temperature  $T$  at certain magnetic field  $B = 10 \text{ T}$

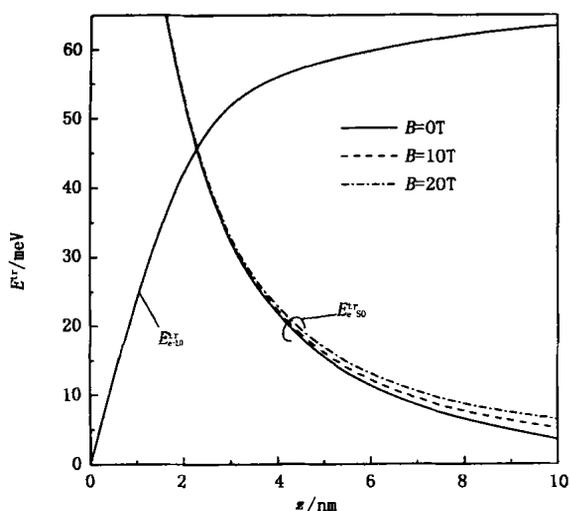


图3 在  $T=80\text{K}$  时,电子与 LO 声子和 SO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$  和  $E_{e-SO}^{tr}$  在不同磁场  $B$  下随距离晶体表面的深度  $z$  的变化关系

Fig. 3 The relationship between the self-trapping energy  $E_{e-LO}^{tr}$  and  $E_{e-SO}^{tr}$ , induced the interaction of the electron with both LO phonon and SO phonon, and the depth from the crystal surface  $z$  at different magnetic field  $B$  at certain temperature  $T=80\text{K}$

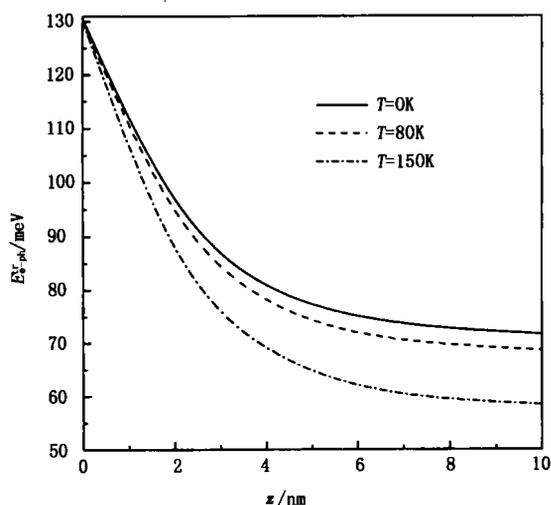


图4 在  $B=10\text{T}$  时,总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  在不同温度  $T$  下随距离晶体表面的深度  $z$  的变化关系

Fig. 4 The relationship between the self-trapping energy  $E_{e-ph}^{tr}$  and the depth from the crystal surface  $z$  at different temperature  $T$  at certain magnetic field  $B=10\text{T}$

场  $B$  下随距离晶体表面深度  $z$  的变化关系.由图可以看出,电子与体 LO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$  与外磁场  $B$  无关,而电子与表面 SO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-SO}^{tr}$  随磁场  $B$  的增加而增大,这说明,外磁场不影响电子与体 LO 声子相互作用,它只加强电子与表面 SO 声子的相互作用.

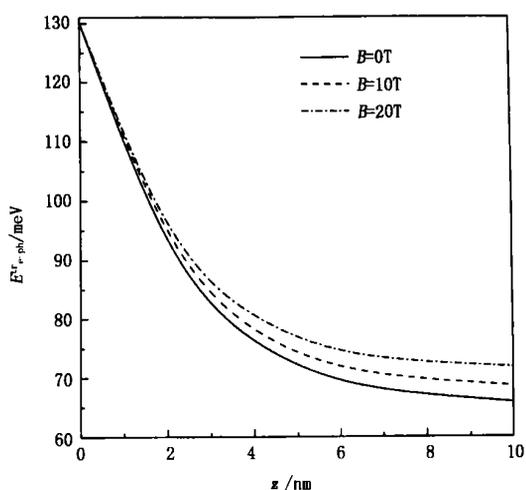


图5 在  $T=80\text{K}$  时,总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  在不同磁场  $B$  下随距离晶体表面的深度  $z$  的变化关系

Fig. 5 The relationship between the self-trapping energy  $E_{e-ph}^{tr}$  and the depth from the crystal surface  $z$  at different magnetic  $B$  at certain temperature  $T=80\text{K}$

图4表示在外磁场一定( $B=10\text{T}$ )时,AgCl 晶体中表面磁极化子的总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  在不同温度  $T$  下随距离晶体表面深度  $z$  的变化关系.由图可以看出,总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  随距离晶体表面深度  $z$  的增加而迅速减小且最后趋向一定值.这是由于在晶体表面附近,电子与表面 SO 声子相互作用对自陷能的贡献是主要的,而当距离晶体表面很深时,电子与体 LO 声子相互作用对自陷能的贡献变成主要的了.从图4还可看出,总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  随温度  $T$  的升高而减小,且当  $T > 80\text{K}$  时,它随温度的变化不明显,但当  $T < 80\text{K}$  时,它随温度的变化非常明显.

图5表示在温度一定( $T=80\text{K}$ )时,AgCl 晶体中表面磁极化子的总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  在不同磁场  $B$  下随距离晶体表面深度  $z$  的变化关系.由图可以看出,总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  随磁场的增加而增大,这是由于电子与表面 SO 声子相互作用对自陷能的贡献随磁场的增加而增大所造成.

#### 4 结论

我们的研究表明,不同支声子与电子相互作用对表面磁极化子自陷能的贡献及它们随距离晶体表面的深度、外磁场和温度变化的情况大不相同.

(1) 电子与体 LO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$  随距离晶体表面深度  $z$  的增加而增加并最后趋于一定值,而电子与表面 SO 声子相互作用所产生的自陷能  $E_{e-SO}^{tr}$  在表面附近很大,但随距离晶

体表面深度  $z$  的增加而迅速减小,最后趋于零.表面磁极化子的总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  随距离晶体表面深度  $z$  增加而减小,最后趋向一定值,在晶体表面附近,电子与表面 SO 声子相互作用对自陷能的贡献  $E_{e-so}^{tr}$  是主要的,而当距离晶体表面很深时,电子与体 LO 声子相互作用对自陷能的贡献  $E_{e-LO}^{tr}$  变成主要的了.

(2)  $E_{e-LO}^{tr}$  和  $E_{e-so}^{tr}$  随温度  $T$  的升高而减小,而且  $E_{e-LO}^{tr}$  随温度  $T$  的变化要比  $E_{e-so}^{tr}$  明显得多.总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  随温度  $T$  的升高而减小.当  $T < 80$  K 时,它们随温度  $T$  的变化不明显,但当  $T > 80$  K 时,它们随温度  $T$  的变化非常明显.

(3) 自陷能  $E_{e-LO}^{tr}$  与磁场  $B$  无关,只有  $E_{e-so}^{tr}$  随磁场  $B$  的增加而增大,总自陷能  $E_{e-ph}^{tr}$  随磁场  $B$  的增加而增加.

#### REFERENCES

- [1] Wu Xiao-Guang, Peeters F M, Devreese J T. Two-dimensional polaron in magnetic field. *Phys. Rev.*, 1985, B32: 7964—7969
- [2] Larsen D M. Perturbation theory for the two-dimensional polaron in a magnetic field. *Phys. Rev.*, 1986, B33: 799—806
- [3] Wei B H, Yu K W, Ou F. Properties of interface polaron in a magnetic field of arbitrary strength. *J. Phys. Condens. Matter.*, 1994, 6: 1893—1902
- [4] Wei B H, Yu K W. Self-energy of a magnetopolaron at the interface of polar crystals. *J. Phys. Condens. Matter.*, 1995, 7: 1059—1067
- [5] Haga E. Note on the slow electron in polar crystal. *Progr. Theor. Phys.*, 1954, 11: 449—460
- [6] Pan Jin-Sheng. The surface or interface polaron in polar crystals. *Phys. Stat. Sol (b)*, 1985, B127: 307—318
- [7] Xiao J L, Xiao W. Influence of the interaction between phonon in polar crystals. *Phys. Rev.*, 1998, B58: 1678—1688
- [8] Huybrechts J. Note on the ground-state energy of the Feynman polaron. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1976, 9: L211—212
- [9] Tokuda N. A variational approach to the polaron problem. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1980, 13: L851—855
- [10] Eerdunchaolu, XIAO Jing-Lin. Magnetic field and temperature dependence of effective mass of the surface polaron in polar crystals. *Journal of Infrared and Millimeter Waves* (额尔敦朝鲁, 肖景林. 极性晶体中表面极化子有效质量的磁场和温度依赖性. *红外与毫米学报*), 1997, 16(5): 384—387
- [11] Xiao J L, Eerdunchaolu, Xiao W. Magnetic field and temperature dependence of the mass of a surface polaron in polar crystals. *J. Phys. Soc. Japan.*, 2002, 71(5): 1332—1338
- [12] Kartheuser. *Polarons In Ionic Crystals and Polar Semiconductors*. Amsterdam: North Holland, 1972