

自旋和声子之间相互作用对 TlBr 晶体中 表面磁极化子性质的影响

李子军¹, 王成舜², 肖景林^{1,3}

(1. 内蒙古民族师范学院 物理系, 内蒙古 通辽 028043; 2. 内蒙古呼伦贝尔学院 物理系, 内蒙古 海拉尔 021008;
3. 中国科学院激发态物理开放研究实验室, 吉林 长春 130021)

摘要: 在考虑电子自旋和声子之间相互作用的同时, 采用线性组合算符和微扰法研究半无限 TlBr 晶体内表面磁极化子处于基态时的振动频率和诱生势与磁场 B 和距晶体表面距离(坐标) z 之间的依赖关系。

关键词: 表面磁极化子; 自旋; 声子之间相互作用; 振动频率; 诱生势

中图分类号: O471.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-7032(2000)02-0089-05

1 引 言

随着磁光技术的发展, 人们对磁场中极化子的性质产生了浓厚的兴趣。Larsen^[1]采用新颖的算符法研究了磁场中二维极化子的性质。Peeters 和 Devreese^[2,3]采用 Feynman 路径积分法讨论了磁极化子的性质。Wei 等^[4,5]利用格林函数方法研究了界面磁极化子的诱生势和自能。本文作者之一^[6]用线性组合算符法讨论了表面磁极化子的性质。

事实上, 到目前为止人们对表面磁极化子性质的研究均是限于忽略电子自旋在磁场中的附加能量和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的近似下所进行计算的, 考虑电子自旋和相应的相互作用对表面磁极化子性质影响的研究甚少。本文考虑电子自旋在磁场中的附加能量和计及相应相互作用的影响, 采用线性组合算符和微扰法研究半无限 TlBr 晶体内表面磁极化子处于基态时的振动频率和诱生势的性质。

2 哈密顿量及理论计算

设 TlBr 晶体表面位于 $x-y$ 平面, 表面法线方向在 z 轴上, 在 $z > 0$ 的半无限空间里充满着 TlBr 晶体, $z < 0$ 的半无限空间是真空。晶体内的电子在表面附近运动(近表面, 但 $z > 0$)。稳恒磁场沿 z 方向, 矢势用 $\vec{A} = B(-y/2, x/2, 0)$ 描

写, 考虑电子自旋能量为 $(\hbar/m_e c) \vec{S} \cdot \vec{B}$ ^[7], 则磁场内电子—声子系的哈密顿量可写为

$$H = \frac{1}{2m} P_z^2 + \frac{e^2(\epsilon_\infty - 1)}{4z\epsilon_\infty(\epsilon_\infty + 1)} + \frac{1}{2m} \left(P_x - \frac{1}{4}\beta^2 y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(P_y + \frac{1}{4}\beta^2 x \right)^2 + \sum_{\vec{w}} \hbar\omega_L a_{\vec{w}}^\dagger a_{\vec{w}} + \sum_{\vec{Q}} \hbar\omega_S b_{\vec{Q}}^\dagger b_{\vec{Q}} + \sum_{\vec{w}} \frac{1}{W} \sin(W_z z) [V_{\vec{w}}^* \exp(-i\vec{w} \cdot \vec{\rho}) a_{\vec{w}}^\dagger + Hc] + \sum_{\vec{Q}} \frac{1}{Q} \exp(-Qz) [c^* \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{\rho}) b_{\vec{Q}}^\dagger + Hc] + (\hbar/m_e c) \cdot \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (1a)$$

$$V_{\vec{w}}^* = i \left(\frac{4\pi e^2 \hbar \omega_L}{\epsilon V} \right)^{1/2}, \quad c^* = i \left(\frac{\pi e^2 \hbar \omega_S}{\epsilon^* S} \right)^{1/2}, \quad \frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \quad (1b)$$

$$\frac{1}{\epsilon^*} = \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} - \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 1}, \quad \beta^2 = \frac{2eB}{c}, \quad \omega_c = \frac{eB}{mc}, \quad \omega_0 = \frac{eB}{m_e c} \quad (1c)$$

$$\alpha_L = \frac{me^2}{\epsilon \hbar^2 u_L}, \quad \alpha_S = \frac{me^2}{\epsilon^* \hbar^2 u_S}, \quad u_L = \left(\frac{2m\omega_L}{\hbar} \right)^{1/2}, \quad u_S = \left(\frac{2m\omega_S}{\hbar} \right)^{1/2} \quad (1d)$$

式中 \vec{S} 是电子自旋算符, 电子自旋量子数 $m_S = \pm \frac{1}{2}$, m_e 是自由电子质量, 其余各量的意义与文献[6]相同。

收稿日期: 1999-08-18; 修订日期: 1999-12-05

资助项目: 中科院激发态物理开放研究实验室和内蒙古自然科学基金资助课题

作者简介: 李子军(1957-), 男, 辽宁朝阳人, 内蒙古民族师范学院副教授, 主要从事凝聚态光学性质的研究。

把 H 分为平行和垂直于晶体表面的两部分 H_{\parallel} 和 H_{\perp}

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

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

其余部分为 H_{\parallel} 。在绝热近似下, 处理 $x-y$ 平面内的运动时, 将 z 看成参量。对 H_{\parallel} 作两次么正变换, 再对电子的横向运动引进线性组合算符

$$U_1 = \exp \left[-i \left(\sum_{\vec{w}} A_1 a_{\vec{w}}^{\dagger} a_{\vec{w}} \vec{w}_{\parallel} + \sum_{\vec{Q}} A_2 b_{\vec{Q}}^{\dagger} b_{\vec{Q}} \vec{Q} \right) \cdot \vec{\rho} \right] \quad (3a)$$

$$U_2 = \exp \left[\sum_{\vec{w}} (a_{\vec{w}}^{\dagger} f_w - a_{\vec{w}} f_w^*) + \sum_{\vec{Q}} (b_{\vec{Q}}^{\dagger} g_Q - b_{\vec{Q}} g_Q^*) \right] \quad (3b)$$

$$P_{\parallel j} = \left(\frac{m\hbar\lambda}{2} \right)^{1/2} (b_j + b_j^*) \quad (j = x, y) \quad (4)$$

$$\rho_j = i \left(\frac{\hbar}{2m\lambda} \right)^{1/2} (b_j - b_j^*)$$

式中 f_w (f_w^*)、 g_Q (g_Q^*) 和 λ 都为变分参量。对于我们所讨论的表面电子与表面光学(SO)声子耦合强, 但与体纵光学(LO)声子耦合弱的情形, $A_1 = 1$ 、 $A_2 = 0$ 。则

$$\mathcal{H}_{\parallel} = U_2^{-1} U_1^{-1} H_{\parallel} U_1 U_2 = H_{\parallel}^0 + H'_{\parallel} \quad (5a)$$

$$H'_{\parallel} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\vec{w} \neq \vec{w}'} (a_{\vec{w}}^{\dagger} + f_w^*) (a_{\vec{w}'} + f_{w'}) (a_{\vec{w}} + f_w) \cdot (a_{\vec{w}'} + f_{w'}) \vec{w}_{\parallel} \cdot \vec{w}'_{\parallel} \quad (5b)$$

其余部分为 H_{\parallel}^0 , H'_{\parallel} 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。与 H_{\parallel}^0 相比, H'_{\parallel} 很小, 故可用微扰法处理。 H_{\parallel}^0 是未扰部分, 取其基态波函数为 $|\psi\rangle = |\varphi(\vec{\rho})\rangle|0\rangle$, $|\varphi(\vec{\rho})\rangle$ 是描写表面磁极化子态的波函数, $|0\rangle$ 是零声子态。计算 $\langle\psi|H_{\parallel}^0|\psi\rangle = \langle\varphi(\vec{\rho})|F(\lambda, f_w, g_Q)|\varphi(\vec{\rho})\rangle$ 。这里 $F(\lambda, f_w, g_Q)$ 是变分参量函数。利用变分技术可得

$$\lambda = \left[\frac{1}{4} \omega_c^2 + 2\alpha_S \omega_S^2 G(\lambda, z) \right]^{1/2} \quad (6a)$$

$$G(\lambda, z) = \int_0^{\infty} x^2 e^{-\frac{\omega_S^2 x^2}{\lambda^2} - 2u_S x} dx \quad (6b)$$

$$E_1 = \frac{1}{2} \hbar\lambda + \frac{\hbar\omega_c^2}{8\lambda} + m_S \hbar\omega_0 - \alpha_L \hbar\omega_L \left[\frac{\pi}{2} - M(z) \right] - \alpha_S \hbar\omega_S K(\lambda, z) \quad (7a)$$

$$M(z) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-2u_L x}}{1+x^2} dx \quad (7b)$$

$$K(\lambda, z) = \int_0^{\infty} e^{-\frac{\omega_S^2 x^2}{\lambda^2} - 2u_S x} dx \quad (7c)$$

$x-y$ 平面内表面磁极化子的有效哈密顿量为

$$H_{\parallel \text{eff}} = E_1 + \Delta E' \quad (8a)$$

$$\Delta E' = - \sum_n' \frac{|(H'_{\parallel})_{0n}|^2}{E_n - E_0} = -\alpha_L^2 \hbar\omega_L N(z) \quad (8b)$$

$$N(z) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{(1 - e^{-2u_L x})(1 - e^{-2u_L y}) x^2 y^2 dx dy}{(1+x^2)^2 (1+y^2)^2 (2+x^2+y^2)} \quad (8c)$$

表面磁极化子的有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = H_{\perp} + H_{\parallel \text{eff}} = \frac{1}{2m} P_z^2 + \frac{1}{2} \hbar\lambda + \frac{\hbar\omega_c^2}{8\lambda} + m_S \hbar\omega_0 + V_{\text{img}} + V_i^L + V_i^{LL} + V_i^S \quad (9a)$$

$$V_{\text{img}} = \frac{e^2(\epsilon_{\infty} - 1)}{4z\epsilon_{\infty}(\epsilon_{\infty} + 1)} \quad (9b)$$

$$V_i^L = -\alpha_L \hbar\omega_L \left[\frac{\pi}{2} - M(z) \right] \quad (9c)$$

$$V_i^{LL} = -\alpha_L^2 \hbar\omega_L N(z) \quad (9d)$$

$$V_i^S = -\alpha_S \hbar\omega_S K(\lambda, z) \quad (9e)$$

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{img}} + V_i^L + V_i^{LL} + V_i^S \quad (9f)$$

式中 V_i^L 和 V_i^S 分别是电子与 LO 和 SO 声子之间相互作用引起的诱生势, V_i^{LL} 是电子在反冲效应中发射和吸收不同波矢(LO)声子之间相互作用所引起的诱生势, V_{img} 是象势, V_{eff} 是有效相互作用势。

3 数值计算及结果讨论

为了更清楚地说明电子自旋和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对表面磁极化子性质的影响, 我们对 TlBr 晶体作数值计算(TlBr 的有关实验数据为^[8]: $\epsilon_{\infty} = 5.64$, $\epsilon_0 = 35.10$, $m/m_e = 0.315$, $\alpha_L = 2.55$, $\alpha_S = 4.36$, $\omega_L = 2.218 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $\omega_S = 2.073 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $\hbar\omega_L = 14.60 \text{ meV}$, $\hbar\omega_S = 13.65 \text{ meV}$)。

图 1 给出了 $z = 3 \text{ nm}$ 时磁极化子的振动频率 λ 与磁场 B 之间的关系。由图可见, 振动频率随磁场增加而增加, 但较缓慢, 说明磁场对频率的作用不是很大。

图 2 展示了 $B = 10 \text{ T}$ 时磁极化子的振动频率

λ 与坐标 z 之间的关系。图示表明, 振动频率随坐标 z 的增加而急剧减小, 说明坐标对频率的影

响较为显著。

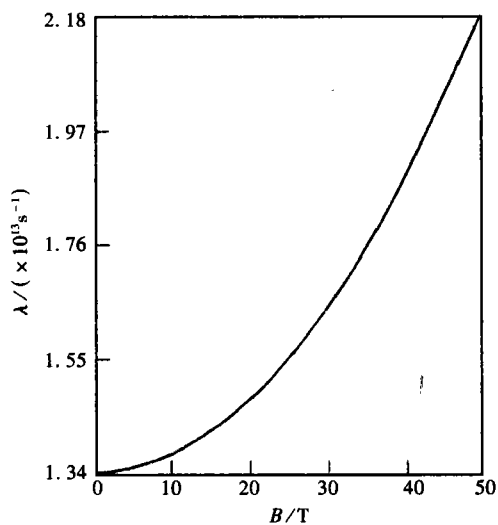


图 1 $z = 3\text{nm}$ 时, 表面磁极化子的振动频率 λ 与磁场 B 的关系曲线

Fig. 1 Relational curve of the vibration frequency of surface magnetopolaron λ with magnetic field B at $z = 3\text{nm}$.

图 3 描绘了 B 不同时, 表面磁极化子的诱生势 V 与坐标 z 之间的关系曲线, 其中 a、b 和 c 分别表示象势 V_{img} 、声子之间相互作用引起的诱生势 V_i^{LL} 和电子与 LO 声子之间相互作用引起的诱生势 V_i^L ; d、e 分别表示 $B = 40\text{T}$ 及自旋量子数 m_S 为 $\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$ 时的电子自旋能量 $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ 和 $-\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ 。

图 4 给出了当 $B = 0, 40\text{T}$ 和很大时, 表面磁极化子的诱生势 V_i^S 和有效相互作用势 V_{eff} 与坐标 z 的关系曲线。其中 a、b 和 c 分别表示 $B = 0, 40\text{T}$ 和很大时, 电子与 SO 声子相互作用引起的诱生势 $V_i^S(0)$ 、 $V_i^S(40)$ 和 $V_i^S(\infty)$; d、e 和 f 分别表示 $B = 0, 40\text{T}$ 和很大时, 磁极化子的有效相互作用势 $V_{\text{eff}}(0)$ 、 $V_{\text{eff}}(40)$ 和 $V_{\text{eff}}(\infty)$ 。

由图 3 和 4 可见, 当 z 很小时, $B = 0$ 和 40T 的 $V_i^S(0)$ 和 $V_i^S(40)$ 以及 $V_{\text{eff}}(0)$ 和 $V_{\text{eff}}(40)$ 相差无几, 只有当 z 较大时, 它们才有微小的差别; 自

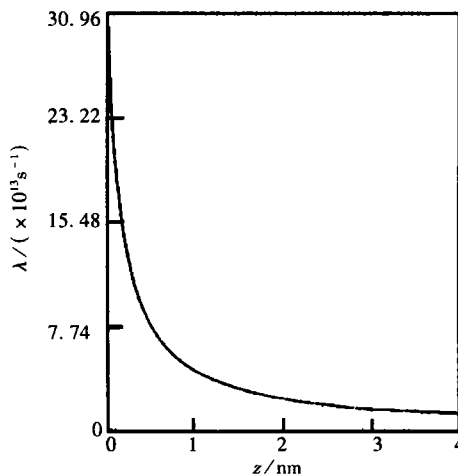


图 2 $B = 10\text{T}$ 时, 表面磁极化子的振动频率 λ 与坐标 z 的关系曲线

Fig. 2 Relational curve of the vibration frequency of surface magnetopolaron λ with coordinate z at $B = 10\text{T}$.

旋作用的影响与坐标 z 无关; 当 z 较小时, 声子之间相互作用的影响较小, 当 z 较大时, 其影响才相对较大。在 $z = 4\text{nm}$ 处, 虽然电子自旋能量和声子之间相互作用能量与磁极化子的有效相互作用势和电子—LO 声子之间相互作用引起的诱生势相比较小, 但电子自旋能量 $\frac{1}{2}\hbar\omega_0(40)$ 与 $V_i^S(\infty)$ 、 $V_i^S(40)$ 、 $V_i^S(0)$ 和 V_{img} 之比的绝对值分别为: 0.1046, 0.1302, 0.1428 和 0.2078, 声子之间相互作用能量 V_i^{LL} 与 $V_i^S(\infty)$ 、 $V_i^S(40)$ 、 $V_i^S(0)$ 和 V_{img} 之比的绝对值分别为: 0.1690, 0.2104, 0.2308 和 0.3359。由此可见, 将声子之间相互作用和电子自旋作用视作很小而忽略也是有条件的。由图 3 还可看出, 在 z 不同的范围内, 声子之间相互作用的影响和电子自旋作用的影响相比, 强弱程度不同。如当 $z < 1.6\text{nm}$ 时, 电子自旋作用的影响强于声子之间相互作用的影响; 而当 $z > 1.6\text{nm}$ 时, 情形恰好相反。

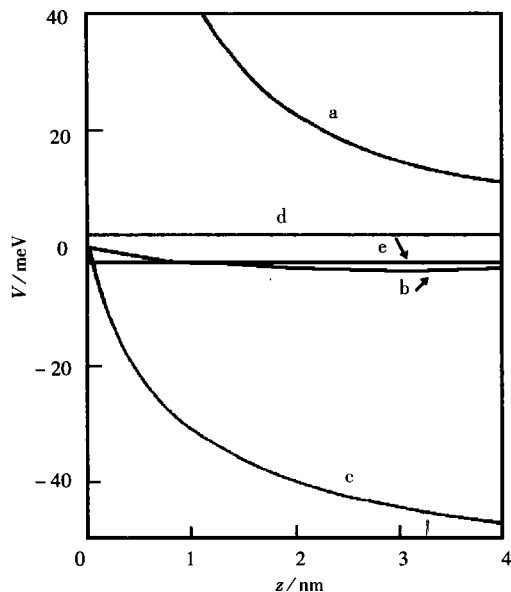


图 3 B 不同时, 表面磁极化子的诱生势 V 与坐标 z 的关系曲线 (a、b、c、d、e 分别表示 V_{img} 、 V_i^{LL} 、 V_i^L 、 $\frac{1}{2}\hbar\omega_0(40)$ 、 $-\frac{1}{2}\hbar\omega_0(40)$)

Fig. 3 Relational curves of induced potential of surface magnetopolaron V with coordinate z at different B (a, b, c, d and e are V_{img} , V_i^{LL} , V_i^L , $\frac{1}{2}\hbar\omega_0(40)$ and $-\frac{1}{2}\hbar\omega_0(40)$, respectively).

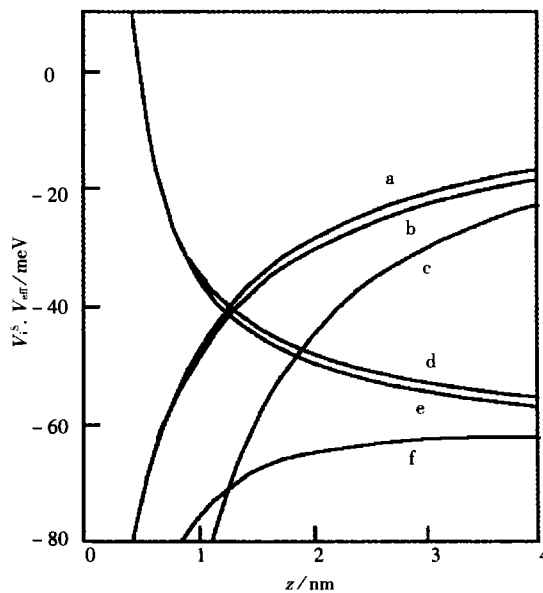


图 4 当 $B = 0, 40\text{T}$ 和很大时, 表面磁极化子的诱生势 V_i^S 和有效相互作用势 V_{eff} 与坐标 z 的关系曲线 (a、b、c、d、e、f 分别表示 $V_i^S(0)$ 、 $V_i^S(40)$ 、 $V_i^S(\infty)$ 、 $V_{\text{eff}}(0)$ 、 $V_{\text{eff}}(40)$ 、 $V_{\text{eff}}(\infty)$)

Fig. 4 Relational curves of induced potential V_i^S and effective interaction potential V_{eff} of surface magnetopolaron with coordinate z at $B = 0, 40\text{T}$ and ∞ (a, b, c, d, e and f are $V_i^S(0)$, $V_i^S(40)$, $V_i^S(\infty)$, $V_{\text{eff}}(0)$, $V_{\text{eff}}(40)$ and $V_{\text{eff}}(\infty)$, respectively).

参 考 文 献

- [1] Larsen D M. Perturbation theory of the two-dimensional polaron in a magnetic field [J]. *Phys. Rev.*, 1986, B33:799 - 806.
- [2] Peeters F M, Wu X G, Devreese J T. Landau levels above the optical-phonon continuum in two and three dimensions [J]. *Phys. Rev.*, 1986, B33:4338 - 4340.
- [3] Peeters F M, Devreese J T. Polaron cyclotron mass: validity of second-order perturbation theory [J]. *Solid State Commun.*, 1986, 58:861 - 863.
- [4] Wei B H, Yu K W, Ou F. Properties of an interface polaron in a magnetic field of arbitrary strength [J]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 1994, 6:1893 - 1902.
- [5] Wei B H, Yu K W. Self-energy of a magnetopolaron at the interface of polar crystals [J]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 1995, 7:1059 - 1067.
- [6] Xiao J L, Xiao W. Influence of the interaction between phonons on the properties of the surface magnetopolaron in polar crystals [J]. *Phys. Rev.*, 1998, B58:1678 - 1688.
- [7] Callaway J. *Quantum Theory of the Solid State* [M]. Chap. 6. New York: Academic Press, 1976:489.
- [8] Kartheuser E. *Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors* [C]. Amsterdam: North-Holland, 1972:725.

Influence of Spin and Interaction between Phonons on the Properties of Surface Magnetopolaron in TlBr Crystal

LI Zi-jun¹, WANG Cheng-shun², XIAO Jing-lin^{1,3}

(1. *Department of Physics, Inner Mongolia National Teacher's College, Tongliao 028043, China;*

2. *Department of Physics, Inner Mongolia Hulunbei'er College, Haila'er 021008, China;*

3. *Laboratory of Excited State Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130021, China)*

Abstract

With the development of magneto-optical technology, the properties of the polaron in magnetic field have been of considerable interest. Larsen proposed a novel operator method to investigate the properties of 2D polarons. Peeters et al discussed the properties of the magnetopolaron using the Feynmann path-integral approach. Wei and co-workers studied the induced potential and the self-energy of an interface magnetopolaron using the Green-function method. The properties of the surface magnetopolaron have been discussed by the method of a linear-combination operator and a perturbation by the present authors and co-workers.

In fact, so far research on the polaron has been restricted to approximation and calculation where the electron spin and the interaction between phonons of different wave vectors in the recoil process are neglected.

There is weak bulk but strong surface coupling between the electrons and phonons for semi-infinite TlBr crystal in a magnetic field. So far, research into this has been very scarce.

The purpose of this present paper is to explore the effects of the electron spin and the interaction between phonons of different wave vectors in the recoil process on the properties of the surface polaron in magnetic field. With both the weak coupling between the electron and bulk LO phonon and the strong coupling between the electron and SO phonon included, an expression for the effective Hamiltonian of the surface magnetopolaron is obtained. With considering the electron spin and the corresponding interaction, the influence on the effective Hamiltonian, vibration frequency, induced potential and effective interaction potential of the surface magnetopolaron in semi-infinite TlBr crystal are investigated by a linear combination operator and perturbation method. Numerical calculations for a TlBr crystal, as an example, are performed, and some properties of the vibration frequency and the induced potential of the surface magnetopolaron are discussed.

Key words: surface magnetopolaron; spin; interaction between phonons; vibration frequency; induced potential