第 21 卷 第 4 期
2000 年 12 月

发 光 学 报
CHINESE JOURNAL OF LUMINESCENCE

Vol. 21 No. 4
Dec., 2000

通过形变势弱耦合表面极化子的性质

乌云其木格[1], 肖景林[1,2], 额尔敦朝鲁[1]

(1. 内蒙古民族大学 物理系, 内蒙古 通辽 028043; 2. 中国科学院激发态物理开放研究实验室, 吉林 长春 130021)

摘要: 采用 Huybrechts 线性组合算符和幺正变换法, 导出了晶体中电子与表面光学声子和表面声学声子均为弱耦合极化子的有效哈密顿量, 并对两种极限情况进行了讨论。

关 键 词: 表面极化子; 弱耦合; 有效哈密顿量
中图分类号: O471.3 文献标识码: A 文章编号: 1000-7032(2000)04-0342-03

1 引 言

由于半导体表面工艺和实验技术的不断发展, 目前人工制造新型的超晶格材料已成为可能, 因此对超晶格和量子阱异质结的研究, 日益受到国内外许多物理学工作者的注意。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和现象。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。

七十年代初, Ibach[1] 和 Lucas 等人[2] 进行了表面电子的散射实验, 用以观察表面声子对电子的作用。Sak[3] 和 Evans and Mills[4] 首先从理论上解释了 Ibach 等人的实验, 导出了电子-表面声子相互作用的哈密顿量。在半无限晶体中运动的电子的性质十分复杂, Mills[5] 指出, 电子在晶体表面附近运动时, 表面光学声子与电子相互作用使电子周围产生极化云, 而表面声学声子与电子间的耦合虽弱, 但能使电子"陷"在表面附近运动。理论研究证明, 在距离晶体表面小于极化子半径的范围内, 可以把它看成一个纯粹的二维晶体, 在这个范围内晶体内部的体纵光学声子对带电粒子没有作用, 因此, 表面层附近的电子只和表面光学(SO) 声子及表面声学(SA) 声子相互作用。Ueba[6] 讨论了电子在表面声子场中同时与 SO 声子及 SA 声子相互作用的性质。肖景林[7] 研究了半导体中与表面声学声子和体纵光学声子弱耦合、与表面光学声子强耦合的表面电子的性质。Toyozawa[8] 采用形变势的概念研究了电子通过形变势与晶格声学振动相互作用形成的准粒子-声学形变势(ADP) 极化子。最近, 赵翠兰等[9] 研究了与形变势相互作用的表面极化子的性质。从局域电子的观点看, 研究电子通过形变势与声学声子的相互作用是颇有意义的。本文采用 Huybrechts 线性组合算符和幺正变换法导出了晶体中电子与 SO 声子和 SA 声子均为弱耦合体系的有效哈密顿量, 并对两种极限情况进行了讨论。

2 哈密顿量与变分计算

设在 $z > 0$ 的半无限空间里充满着晶体, 晶体表面在 $x - y$ 平面内, 电子在晶体内(离表面的距离 $z > 0$) 运动, 电子-声子相互作用体系的哈密顿量可以写成[6]

$$H = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{P_{\|}^2}{2m} + \frac{e^2(\varepsilon_\infty - 1)}{4z\varepsilon_\infty(\varepsilon_\infty + 1)} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_s a_{\vec{q}}^{+} a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_q b_{\vec{q}}^{+} b_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} e^{-qz}\left(V_q^* \vec{a}_{\vec{q}}^{+} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\rho}} + h\cdot c\right) + \sum_{\vec{q}} \Gamma_q e^{-\eta qz}\left(b_{\vec{q}}^{+} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\rho}} + h\cdot c\right) \tag{1a}$$

$$V_q = 2\pi i e\left(\frac{\hbar\omega_s}{4\pi\varepsilon S q}\right)^{1/2}, \quad \varepsilon = \frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 1} - \frac{\varepsilon_\infty - 1}{\varepsilon_\infty + 1}$$
$$\Gamma_q = E_d(1 - \eta^2)\left(\frac{\hbar}{2SkP_0}\right)^{1/2} q, \quad \omega_q = V_R q \tag{1b}$$

(1) 式中各量的物理意义与文献[8] 相同。

类似于绝热近似的方法[10], 我们可以将哈密顿量分成两部分

$$H = H_{\perp} + H_{\|} \tag{2a}$$

收稿日期: 2000-06-20; 修订日期: 2000-08-25
基金项目: 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。

作者简介: 乌云其木格(1964-), 女, 蒙古族, 内蒙古通辽人, 讲师, 主要从事晶体表面极化子的研究。

其中
$$H_{\perp}=\frac{P_z^2}{2m}+\frac{e^2(\varepsilon_\infty-1)}{4z\varepsilon_\infty(\varepsilon_\infty+1)} \tag{2b}$$
其余部分为 $H_{\parallel}$。在考虑 $H_{\parallel}$ 时, 视 z 为参变量。

对于电子的横向运动的动量和坐标, 引进线性组合算符[11]
$$P_{\parallel j}=\left(\frac{m\hbar\lambda}{2}\right)^{1/2}(B_j^+ + B_j),$$
$$\rho_j=i\left(\frac{\hbar}{2m\lambda}\right)^{1/2}(B_j^+ - B_j),(j=x,y) \tag{3}$$
其中 λ 为变分参量, 算符 B_j 和 B_j^+ 满足玻色对易关系。

(3) 式代入(2) 式, 并作如下两次幺正变换
$$U_1=\exp\left[-i\left(A_1\sum_q a_q^+ a_q \vec{q}+A_2\sum_{\bar{q}} b_{\bar{q}}^+ b_{\bar{q}}\vec{q}\right)\cdot\rho\right]$$
$$U_2=\exp\left[\sum_q(a_q^+ f_q-a_q f_q^*)+\sum_q(b_q^+ g_q-b_q g_q^*)\right] \tag{4}$$
其中 f_q, g_q 为变分参量, $A_i\,(i=1,2)$ 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 声子和 SA 声子均为弱耦合体系, $A_1=A_2=1$。

选取基态波函数为 $|\Phi\rangle=|\phi(\rho)\rangle|0\rangle$, 其中 $|\phi(\rho)\rangle$ 是归一化的表面极化子的波函数, $|0\rangle$ 是零声子态。于是
$$\langle\Phi|U_2^{-1}U_1^{-1}H_{\parallel}U_1U_2|\Phi\rangle=\langle\phi(\rho)|F(\lambda,f_q,g_q)|\phi(\rho)\rangle \tag{5}$$
$F(\lambda,f_q,g_q)$ 称为变分参量函数, 利用变分技术可求出变分参量 $f_q(f_q^*)$, $g_q(g_q^*)$ 和 λ, 将变分参量代入 F 中可得
$$\min F(\lambda,f_q,g_q)=-\alpha_s\hbar\omega_s\eta(z)-\frac{2}{3}\alpha_a\hbar\omega_s\xi(z) \tag{6a}$$
$$\eta(z)\int_0^\infty\frac{u_s e^{-2qz}}{u_s^2+q^2}\mathrm{d}q,\ \xi(z)=\frac{V_R}{u_s\omega_s}\int_0^{q_m}\frac{q^2e^{-2\eta_z q}}{2q_0+q}\mathrm{d}q$$
$$u_s=\left(\frac{2m\omega_s}{\hbar}\right)^{1/2},\quad \alpha_a=E_d^2(1-\eta^2)^2\cdot\frac{3mu_s}{4\pi k\rho V_R\hbar^2},\quad q_0=\frac{mV_R}{\hbar} \tag{6b}$$
其中 q_m 为 Debye 截止波数。最后得极化子的有效哈密顿量为
$$H_{\text{eff}}=H_{\perp}+H_{\parallel\text{eff}}=H_{\perp}+\min F(\lambda,f_q,g_q)$$
$$=\frac{P_z^2}{2m}+\frac{e^2(\varepsilon_\infty-1)}{4z\varepsilon_\infty(\varepsilon_\infty+1)}+V_{e-\text{SO}}(z)+V_{e-\text{SA}}(z) \tag{7a}$$
其中
$$V_{e-\text{SO}}(z)=-\alpha_s\hbar\omega_s\eta(z)$$
$$V_{e-\text{SA}}(z)=-\frac{2}{3}\alpha_a\hbar\omega_s\xi(z) \tag{7b}$$
$$V_{\text{eff}}(z)=\frac{e^2(\varepsilon_\infty-1)}{4z\varepsilon_\infty(\varepsilon_\infty+1)}+V_{e-\text{SO}}(z)+V_{e-\text{SA}}(z)$$
分别表示电子– SO 声子和电子– SA 声子相互作用的诱生势及有效相互作用势。

3　结果与讨论

①电子非常接近晶体表面, 即 $z\ll u_s^{-1}$, 在这种情况下,
$$\eta(z)\approx\frac{\pi}{2},\ \xi(z)\approx\frac{V_R}{\omega_s u_s}\left[\frac{1}{2}q_m^2-\frac{u_s^2V_Rq_m}{\omega_s^2}+\frac{u_s^4V_R^2}{\omega_s^2}-\ln\left(1+\frac{q_m\omega_s}{u_s^2V_R}\right)\right]=R(q_m) \tag{8a}$$
$$H_{\text{eff}}=\frac{P_z^2}{2m}+\frac{e^2(\varepsilon_\infty-1)}{4z\varepsilon_\infty(\varepsilon_\infty-1)}-\frac{\pi}{2}\alpha_s\hbar\omega_s-\frac{2}{3}\alpha_a\hbar\omega_sR(q_m) \tag{8b}$$
从(8b) 式可以看出表面极化子的有效哈密顿量不仅与电子– SO 声子相互作用有关, 而且还与电子– SA 声子相互作用有关。对于典型数据, $R(q_m)\approx1.54$, 这说明电子和表面声学声子耦合要比电子与表面光学声子的耦合弱。

表面极化子的自能为
$$E_S=-\frac{\pi}{2}\alpha_s\hbar\omega_s-\frac{2}{3}\alpha_a\hbar\omega_sR(q_m) \tag{8c}$$
其中第一项为电子– SO 声子相互作用对自能的贡献, 第二项为电子– SA 声子相互作用自能的贡献。SA 声子对自能的贡献仍与 Debye 截止波数有关。

②电子远离晶体表面, 即 $z\gg u_s^{-1}$, 在这种情况下
$$\eta(z)\approx0,\ \xi(z)\approx0 \tag{9a}$$
$$H_{\text{eff}}=\frac{P_z^2}{2m}+\frac{e^2(\varepsilon_\infty-1)}{4z\varepsilon_\infty(\varepsilon_\infty+1)} \tag{9b}$$
由(9) 式可以看出, 极化子远离晶体表面时, 电子– SO 声子相互作用和电子– SA 声子相互作用对有效哈密顿量和自能的影响可以忽略不计, 这时电子与体声子的相互作用是主要的。

参 考 文 献:

[1] Ibacl H. Opical surface phonons in zinc oxide detected by slow-electron sepectroscopy [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1970, **24**: 1416-1418.

[2] Lucas A A, Sunjic M. Fast-electron spectroscopy of surface excitation [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1971, **26**: 229-232.

[3] Sak J. Theory of surface polarons [J]. *Phys. Rev.* B6, 1972, 3981-3986.

[4] Evans E, Mills D L. Theory of surface polarons [J]. *Solid State Commun.*, 1972, **11**: 1093-1098.

[5] Mills D L. Interaction of low energy electrons with surface lattice vibration [J]. *Progr. Surf. Sci.*, 1977, **8**: 143-180.

[6] Ueba H. Electron in surface phonon field [J]. *Phys. Stat. Sol.* (b), 1980, **100**: 705-714.

[7] XIAO Jing-lin. Surface electrons in polar semiconductor [J]. *Chin. J. Lumin.*, 1993, **14**: 82-91(in Chinese).

[8] Toyozawa Y Progr. Self-trapping of an electron by the acoustical mode of lattice vibration [J]. *Theory. Phys.*, 1961, **26**: 29-44.

[9] ZHAO Cui-lan, WANG Zi-an, Xiao Jing-lin. Surface polaron of interacting with the deformation potential in polar crystals [J]. *Chin. J. Lumin.*, 1998, **19**: 1-5(in Chinese).

[10] Licari J J, Evrard R. Electron-phonon interaction in a dielectric slab: effect of the electronic polarizability [J]. *Phys. Rev.* B**15**, 1977, 2254-2264.

[11] Huybrechts W, J. Internal excited state of the optical polaron [J]. *Phys. C. Solid State Phys.*, 1976, **9**: L211-217.

Properties of the Weak-Coupling Surface Polaron via Deformation Potential

WUYUN Qimuge[1], XIAO Jing-lin[1,2], E'ERDUN Chaolu[1]

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

2. *Laboratory of Excited State Processes, Chinese Academy of Sciences, Changchun* 130021, *China*)

Abstract: In the early 1970s, Ibach carried out low-energy electron diffraction experiments on ZnO and other semiconductor surface. Sak, Evans and Mills studied theoretically the surface polaron in polar crystals first and the Hamiltonian of the electron-surface phonon interaction was derived. Mills indicated that when electron moves in the surface vicinity of the crystals, the electron-surface-optical-phonon interaction produces a plarization cloud at the electron around, whereas because of the electron surface acoustic phonon coupling the electron have been trapped at the surface vicinity motion. Theoretical results showed that the surface layer of crystals may be regarded as pure 2D crystals if the distance from the surface is smaller than the radius of polarions. The effect of bulk phonons can be neglected, while surface acoustic and surface optical phonons are taken into account in the surface layer. Veba discussed the properties of the electron, which is a interaction with both the surface optical and acoustic phonons in the surface phonon field. Toyozawa studied the quasi-particle, the acoustic deformation potential(ADP) plaron, formed by the interaction of electrons with acoustic lattice vibration using the concept of the deformation potential. Recently Zhao Cui-lan *et al.* investigated the properties of surface polaron of interaction with the deformation potential. From the point of view of confined electron, studying electron via the deformation potential interaction with acoustic phonon is more significant. The properties of surface polaron in polar crystals, which is a weak coupling with surface optical and surface acoustic phonons, was studied. The effective Hamiltionian of the surface polaron is derived by using linear combination operator and unitary transformation.

Key words: surface polaron; weak-coupling; effective Hamiltonian

Received 20 June 2000