

用不同的近似方法计算极性晶体中强耦合磁极化子有效质量与温度的关系

李子军¹, 王成舜², 肖景林¹

(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)

摘要: 采用改进的线性组合算符法研究极性晶体中强耦合磁极化子的有效质量与温度的关系。详细讨论了在不同的近似计算程度情况下有效质量的温度特性。结果表明: 不同的近似计算程度可给出磁极化子有效质量随温度的升高而增加和减小两种截然相反的结论。

关键词: 不同的近似程度; 强耦合; 磁极化子; 有效质量; 温度特性

中图分类号: O471.3 文献标识码: A 文章编号: 1000-7032-(2000)01-0011-05

1 引 言

近半个世纪以来, 许多学者研究了极化子的有效质量与温度的关系。在这些理论研究中, 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得到了极化子有效质量与温度的不同的关系。Saitok^[1]用费曼路径积分得出极化子有效质量随温度的升高而减小, 许多学者^[2-4]也得出了同样结论。作者之一^[5,6]用线性组合算符方法也得到了同样的结果。但是顾世洵却得到相反的结果, 这一结果从文献[8~10]在足够低的晶格温度下也可得到。利用 Feynman 路径积分, 由极化子理论得到在低温时极化子有效质量随温度的升高而增大, 在一定的有限温度下有效质量达到极大值, 然后随温度的升高而减小^[11]。磁极化子的质量通常由回旋共振实验确定。在极性半导体和极性晶体中有效质量 m^* 由电子和 LO 声子相互作用产生, 无疑回旋共振频率 $\omega^* = eB/m^*c$ 与磁场和温度有关。实验表明^[12], 不同的物质实验结果也是不同的。出现上述不同结论的原因至今还没有更多的学者较深入地研究过。

关于极性晶体中表面或界面磁极化子的性质, 人们采用各种方法进行了深入的研究。但是到目前为止, 极性晶体中强耦合磁极化子的性质研究甚少。采用改进的线性组合算符研究极性晶体中强耦合磁极化子的有效质量与温度的关系, 并详细地讨论有效质量的温度特性与所选取的不同近似计算程度之间的关系。

2 哈密顿量

设外加磁场为 $\vec{B} = (0, 0, B)$, 则极性晶体内的电子与体纵光学(LO)声子系哈密顿量为

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2m}(p_x - \frac{\beta^2}{4}y)^2 + \frac{1}{2m}(p_y + \frac{\beta^2}{4}x)^2 + \sum_{\vec{w}} \dagger \omega a_{\vec{w}} \ddagger a_{\vec{w}} + \sum_{\vec{w}} (V_{\vec{w}}^* e^{-i\vec{w} \cdot \vec{r}} a_{\vec{w}} \ddagger + hc) \quad (1a)$$

$$V_{\vec{w}}^* = \frac{i}{W} \left(\frac{2\pi e^2 \dagger \omega}{\epsilon V} \right)^{1/2}, \quad \frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon_0},$$

$$\beta^2 = \frac{2eB}{c} \quad (1b)$$

$$\omega = \frac{eB}{mc}, \quad \alpha = \frac{me^2}{\epsilon \dagger} \frac{1}{2m\omega} \quad (1c)$$

式中各量的意义与相关文献^[13]相同。

对电子运动的动量和坐标引进改进的线性组合算符

$$p_j = \left(\frac{m \dagger \lambda}{2} \right)^{1/2} (b_j + b_j^\dagger + P_{0j})$$
$$r_j = i \left(\frac{\dagger}{2m\lambda} \right)^{1/2} (b_j - b_j^\dagger) \quad (2)$$

($j = x, y, z$), 其中 λ 和 \vec{P}_0 都是变分参量。系统总动量算符为

$$\vec{P} = \vec{p} + \sum_{\vec{w}} \dagger \vec{w} a_{\vec{w}} \ddagger a_{\vec{w}} \quad (3)$$

对 H 和 $\vec{u} \cdot \vec{P}$ 作么正变换

$$U = \exp \left[\sum_{\vec{w}} (a_{\vec{w}} \ddagger f_{\vec{w}} - a_{\vec{w}} f_{\vec{w}} \ddagger) \right] \quad (4)$$

这里 \bar{u} 是拉格朗日乘子, 可视为极化子平均速度。则

$$H = U^{-1} H U, (\bar{u} \bar{P}) = U^{-1} (\bar{u} \bar{P}) U \quad (5)$$

3 变分法计算

在有限温度下, 取尝试波函数为

$$\Phi = \Phi \{n_j\} \quad (6)$$

其中 Φ 描写电子和 LO 声子态; $\{n_j\}$ 描写极化子态, $\{n_j\}$ 表示极化子数。且满足

$$b_j^\dagger n_j = \overline{n_j + 1} \quad n_j + 1$$

$$b_j n_j = \overline{n_j} \quad n_j - 1 \quad (7)$$

其中 $j = x, y, z$, 计算 $\Phi H - (\bar{u} \bar{P}) \Phi = \Phi F(\lambda, f_w, \bar{u}, \bar{P}_0) \Phi$, 再利用变分技术可给出

$$F(\lambda, u) = \frac{3}{4}(2n + 1) \left[\lambda + \frac{(2n + 1) \hbar \omega^2}{8\lambda} - \frac{1}{2} m u^2 - \alpha \hbar \omega \left(\frac{\lambda}{\pi \omega} \right)^{1/2} \right]$$

$$\left[1 - n + \frac{3}{4} n^2 + \frac{1}{3} m u^2 \frac{\lambda}{\hbar \omega^2} (1 - 3n + \frac{15}{4} n^2) \right] \quad (8a)$$

$$f_w = - \frac{V_w^* B e^{-\frac{\hbar \omega^2}{4m\lambda}}}{\hbar \omega - \hbar \bar{u} \bar{W}} \quad (8b)$$

$$P_0 = \left(\frac{2m}{\hbar \lambda} \right)^{1/2} u \quad (8c)$$

$$B(n, \lambda, W) = 1 - 2n \left(\frac{\hbar}{2m\lambda} \right) W^2 \quad (8d)$$

在计算中考虑了电子在晶体内运动的对称性, 即 $n_x = n_y = n_z = n$ 。B 的取值略去了波矢的二阶以上小量, 但 B^2 的表达式保留到波矢的四阶小量(这是通常习惯选择)。认为电子运动较慢, u 是小量, 则略去了 u 的二次以上高阶小量。还考虑了 \bar{u} 和 \bar{P}_0 同向。所以有

$$6(2n_1 + 1) \lambda_1^2 - (2n_1 + 1) \omega^2 - 4\alpha \left(\frac{\omega \lambda_1^3}{\pi} \right)^{1/2} (1 - n_1 + \frac{3}{4} n_1^2) = 0 \quad (9)$$

进一步可求得

$$\bar{P} = um \left[1 + \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{\lambda_1^3}{\pi \omega} \right)^{1/2} (1 - 3n_1 + \frac{15}{4} n_1^2) \right] \quad (10)$$

由于 u 是极化子平均速度, 故磁极化子有效质量为

$$m_1^* = m \left[1 + \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{\lambda_1^3}{\pi \omega} \right)^{1/2} (1 - 3n_1 + \frac{15}{4} n_1^2) \right] \quad (11)$$

需要指出: 在计算中为确保 u 的二次方及以下和 B^2 的表达式中波矢的四次方及以下诸项, 在给出(11)式时, 计算曾进行到了波矢的六次方项。若计算仅进行到波矢的四次方项, 则 λ 与 n 所满足的关系仍为(9)式所示, 但极化子有效质量为

$$m_2^* = m \left[1 + \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{\lambda^3}{\pi \omega} \right)^{1/2} (1 - 3n_1) \right] \quad (12)$$

若 B^2 的表达式和计算都只进行到波矢的二次方项, 则 λ 与 n 所满足的关系和极化子有效质量分别为

$$6(2n^2 + 1) \lambda^2 - (2n^2 + 1) \omega^2 - 4\alpha \left(\frac{\omega \lambda^3}{\pi} \right)^{1/2} (1 - n^2) = 0 \quad (13)$$

$$m_3^* = m \left[1 + \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{\lambda^3}{\pi \omega} \right)^{1/2} \right] \quad (14)$$

为进一步作理论分析, 下面讨论两种极限情形。

(1) 强磁场

$\omega \gg \omega_c$, (9) 和 (13) 式都给出

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{\sqrt{6}}{6} \omega \quad (15)$$

磁极化子有效质量分别为

$$m_1^* = m \left[1 + \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{\omega^3}{6^{3/2} \pi \omega} \right)^{1/2} (1 - 3n_1 + \frac{15}{4} n_1^2) \right] \quad (16a)$$

$$m_2^* = m \left[1 + \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{\omega^3}{6^{3/2} \pi \omega} \right)^{1/2} (1 - 3n_1) \right] \quad (16b)$$

$$m_3^* = m \left[1 + \frac{2}{3} \alpha \left(\frac{\omega^3}{6^{3/2} \pi \omega} \right)^{1/2} \right] \quad (16c)$$

(2) 弱磁场

$\omega \ll \omega_c$, (9) 和 (13) 式分别给出

$$\lambda_1 = \frac{4}{9} \alpha^2 \frac{\omega}{\pi} \frac{(1 - n_1 + \frac{3}{4} n_1^2)^2}{(2n_1 + 1)^2} \quad (17a)$$

$$\lambda_2 = \frac{4}{9} \alpha^2 \frac{\omega}{\pi} \frac{(1 - n^2)^2}{(2n^2 + 1)^2} \quad (17b)$$

磁极化子有效质量分别为

$$m_1^* = m \left[1 + \frac{16\alpha^4}{81\pi^2} \frac{(1 - n_1 + \frac{3}{4} n_1^2)^3}{(2n_1 + 1)^3} (1 - 3n_1 + \frac{15}{4} n_1^2) \right] \quad (18a)$$

$$m_2^* = m \left[1 + \frac{16\alpha^4}{81\pi^2} \frac{(1 - n_1 + \frac{3}{4} n_1^2)^3}{(2n_1 + 1)^3} (1 - 3n_1) \right] \quad (18b)$$

$$m_3^* = m \left[1 + \frac{16\alpha_i^4}{81\pi^2} \frac{(1 - n_2)^3}{(2n_2 + 1)^3} \right] \quad (18c)$$

4 温度效应及数值计算

在有限温度下, 电子-声子系将不再完全处于基态, 晶格振动不但激发实声子, 同时也使电子受到激发, 极化子的性质要由电子-声子系对各种状态的统计平均值来决定。由量子统计学有

$$\bar{n} = [\exp(\frac{\hbar\lambda}{k_B T}) - 1]^{-1} \quad (19)$$

(19) 式应分别与(9)和(13)式自洽, 从而可给出各种近似情况下磁极化子的振动频率所满足的关系和有效质量分别为

$$6(2\bar{n}_1 + 1)\lambda_1^2 - (2\bar{n}_1 + 1)\omega^2 - 4\alpha \left(\frac{\omega\lambda_1^3}{\pi} \right)^{1/2} (1 - \bar{n}_1 + \frac{3}{4}\bar{n}_1^2) = 0 \quad (20a)$$

$$6(2\bar{n}_2 + 1)\lambda_2^2 - (2\bar{n}_2 + 1)\omega^2 - 4\alpha \left(\frac{\omega\lambda_2^3}{\pi} \right)^{1/2} (1 - \bar{n}_2) = 0 \quad (20b)$$

$$m_1^* = m \left[1 + \frac{2}{3}\alpha \left(\frac{\lambda_1^3}{\pi\omega^3} \right)^{1/2} (1 - 3\bar{n}_1 + \frac{15}{4}\bar{n}_1^2) \right] \quad (20c)$$

$$m_2^* = m \left[1 + \frac{2}{3}\alpha \left(\frac{\lambda_2^3}{\pi\omega^3} \right)^{1/2} (1 - 3\bar{n}_1) \right] \quad (20d)$$

$$m_3^* = m \left[1 + \frac{2}{3}\alpha \left(\frac{\lambda_3^3}{\pi\omega^3} \right)^{1/2} \right] \quad (20e)$$

显然极化子有效质量的温度特性与计算中所选取的近似程度有关。为了更直观地显示这种依赖关系, 以 RbCl 晶体^[14] ($\epsilon = 2.20$, $\epsilon_0 = 4.92$, $\omega = 3.259 \times 10^{13} \text{S}^{-1}$, $\hbar\omega = 21.45 \text{meV}$, $\alpha = 6.3$, $m/m_e = 0.432$) 作数值计算。

图 1 描绘了在不同磁场和近似程度的情况下, 极化子振动频率 λ 与温度 T 之间的依赖关系。 λ_1 是 B^2 的表达式近似到波矢的二次方时极化子的振动频率, λ_2 是 B^2 的表达式近似到波矢的二次方时极化子的振动频率。由图可见, 随着温度的升高, λ 都增加, 但 λ_2 随 T 的增加率大于 λ_1 随 T 的增加率。由图还可以看出, 磁场使 λ_1 增加而使 λ_2 减小, 在图示范围内, 磁场对 λ_1 的影响低温时较高温时显著, 而磁场对 λ_2 的影响基本不随温度而变。

图 2 给出了在不同的磁场和近似程度的情况下, 极化子有效质量 m^* 与温度 T 之间的依赖关系。 m_1^* 和 m_2^* 是在确保 u 的二次方及以下诸项和 B^2 表达式中波矢的二次方及以下诸项的前提

下, 计算分别进行到波矢的六次方和四次方项所给出的极化子的有效质量, 而 m_3^* 是将所有的表示及计算都只近似到波矢的二次方项时给出的极化子的有效质量。由图可见, 随着温度的升高, m_2^* 减小, 而 m_1^* 和 m_3^* 增大, 且 m_3^* 比 m_1^* 增大得迅速。由图还可看出, 磁场使 m_2^* 增大而使 m_1^* 和 m_3^* 减小, 在图示的范围内, 磁场对 m_1^* 、 m_2^* 和 m_3^* 的影响基本与温度无关, 但磁场对 m_1^* 的影响较对 m_2^* 和 m_3^* 的影响显著。

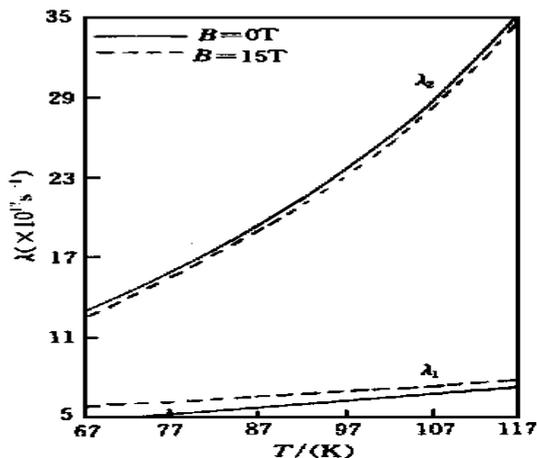


图 1 在不同磁场下 λ - T 关系曲线

Fig. 1 Relation curve of λ - T at different magnetic field.

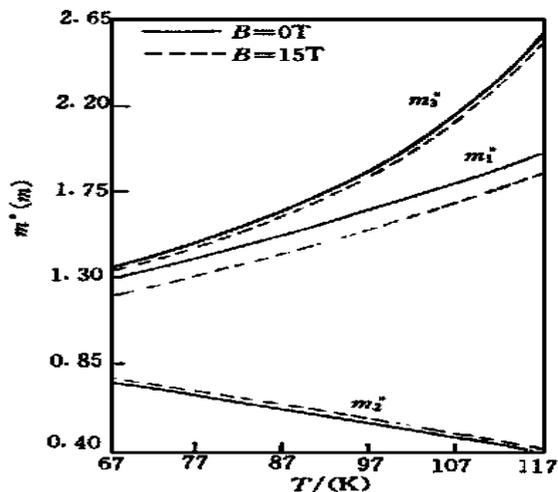


图 2 在不同磁场下 m^* - T 关系曲线

Fig. 2 Relation curve of m^* - T at different magnetic field.

上述结论表明, 即使采用同一理论方法, 只是选取了不同的近似程度, 便可给出极化子有效质量随温度变化的两种截然相反的结果。那么究竟哪一种结果正确, 原则上应该由实验来确定。对此也可作如下的理论分析, 上述结果虽然都是在小波矢近似下得到的, 但对于不同的晶体、不

同的外部环境(如不同的温度或磁场环境)等,近似到波矢的哪一级更为有效合理应该是不同的。可以定性地说,当温度很低时,只近似到波矢的较低级就已足够了;当温度较高时,应考虑到波矢的较高级近似才合理;若温度很高,则应考虑到波矢的更高级近似才切合实际。同样,磁场对近似程度的影响也可作类似的分析。计算结果也表明了这一情形,即当无磁场时,由 m_3^* 可给出

极低温(接近绝对零度)时极化子有效质量与温度的依赖关系,而由 m_1^* 和 m_2^* 都给不出极低温时极化子有效质量与温度的合理的关系。并且随着磁场的加强,由 m_1^* 、 m_2^* 、 m_3^* 给出极化子有效质量与温度的依赖关系,其合理的温度范围都在升高。这也就从一个侧面说明了为什么实验也给出了上述两种截然相反的现象的原因。

参 考 文 献

- [1] Saitoh M. Theory of a polaron at finite temperatures [J]. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1980, **49**: 878.
- [2] Arisawa K, Saitoh M. Diamagnetic susceptibility of a Frohlich polaron [J]. *Phys. Lett.*, 1981, **82A**: 462.
- [3] Li Y C, Gu S W. Polaron in a polar crystal slab at finite temperatures [J]. *J. Phys. Condens Matter*, 1989, **1**: 3201.
- [4] Lee C M, Gu S W, Lam C C. Temperature dependence of strongly coupled surface polaron in potassium iodide semi-infinite polar crystal [J]. *Physica B*, 1997, **229**: 361.
- [5] Sun B Q, Xiao W, Xiao J L. Effective mass of the surface polaron at the finite temperature [J]. *J. Phys. Condens Matter*, 1994, **6**: 8167.
- [6] Eerdunchaolu, Xiao J L. Magnetic field and temperature dependence of effective mass of the surface polaron in polar crystals [J]. *Journal of infrared and millimeter waves.*, 1997, **16**(5): 384(in Chinese).
- [7] Gu S W. The temperature dependence of the polaron effective mass [J]. *Chin. Phys.*, 1981, **1**: 84(in Chinese).
- [8] Peeters F M, Devreese J T. Discontinuous behaviour of a polaron in a high magnetic field at non-zero temperature [J]. *Solid State Commun.*, 1982, **41**: 49.
- [9] Fedyanin V K, Rodriguez C. Temperature and coupling strength dependence of polaron effective mass and radius [J]. *Phys. Status Solid.*, 1982, **110**: 105.
- [10] Peeters F M, Devreese J T. Temperature dependence of the polaron mass in AgBr [J]. *Phys. Rev.*, 1985, **B31**: 5500.
- [11] Wu Xiaoguang, Peeters F M, Devreese J T. Temperature dependence of the polaron mass in a gallium arsenide-aluminum gallium arsenide heterostructure [J]. *Phys. Rev.*, 1987, **B36**: 9765.
- [12] Brummell M A, Nicholas R J, Hopkins M A, *et al.* Modification of the electron-phonon interactions in gallium arsenide-gallium aluminum arsenide heterojunctions [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**: 77.
- [13] Wei B H, Zhao G Z, Gu S W. Magnetic field and temperature dependence of the properties of an interface polaron in an arbitrary magnetic field [J]. *Phys. Rev.*, 1989, **B40**: 7866.
- [14] Kartheuser E. Dielectric properties of polar crystals. Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors [M]. Antwerp Advanced Study Institute 1971 on Frohlich Polarons and Electron-Phonon Interaction in Polar Semiconductors(Amsterdam: North-Holland), 1972: 721.

Temperature Dependence of Effective Mass of Strong Coupling Magnetopolaron in Polar Crystals Calculated by Different Approximation Methods

LI Zi-jun¹, WANG Cheng-shun², XIAO Jing-lin¹

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

2. *Department of Physics, Inner Mongolia Hulunbeier College, Haila'er 021008, China*)

Abstract

Temperature dependence of the effective mass of the strong coupling magnetopolaron in polar crystals are studied by means of an improved linear combination operator method. The temperature characteristic of the effective mass are discussed in detail at different approximation calculation level. The result illustrates that the different approximation calculation level can provided two completely contrary conclusions on temperature dependence of the effective mass of the magnetopolaron.

Key words: different approximation level; strong coupling; magnetopolaron; effective mass; temperature characteristic

Received 20 March 1999