

# 极性半导体中表面激子的性质\*

孙宝权 肖景林

内蒙古民族师院，通辽 028043

(1991年10月8日收到, 1992年2月24日收到修改稿)

本文研究极性半导体中表面激子的性质, 采用微扰法导出表面激子的有效哈密顿量。在计及反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用时, 讨论对电子、空穴间的相互作用的有效势、表面激子的自陷能和自陷条件的影响。

PACC: 7135, 7320, 6550

## 一、引言

激子在半导体表面层中的性质, 对半导体的光学性质, 尤其是光在表面的散射, 影响十分显著。近年来, 许多学者<sup>[1-3]</sup>研究了表面激子的性质。理论证明<sup>[4]</sup>, 在与晶体表面的距离小于极化子半径的范围内, 可以把表面层看作一个纯粹的二维晶体。在这个范围内, 晶体内部的体光学声子对带电粒子没有作用, 所以表面层中的激子只受表面光学声子的影响。梁希侠<sup>[5,6]</sup>曾讨论过弱耦合极性半导体中表面激子的性质。顾世清<sup>[7]</sup>用线性组合算符法研究了弱、中耦合情形以及强耦合情形下表面激子的性质。实际上, 到目前为止, 对表面激子的研究只限于忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用的近似下进行计算。本文采用微扰法导出表面激子的有效哈密顿量, 并考虑表面激子在反冲效应中发射的不同波矢的声子之间的相互作用时, 讨论其对电子、空穴间的相互作用势、表面激子的自陷能和自陷条件的影响。

## 二、哈密顿量和微扰计算

极性半导体中表面激子声子系的哈密顿量为<sup>[2]</sup>

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{p}}^2 - \frac{e^2}{\epsilon_{\infty}\rho} + \sum_{\mathbf{Q}} \hbar\omega_{\mathbf{Q}} a_{\mathbf{Q}}^{\dagger} a_{\mathbf{Q}} + \sum_{\mathbf{Q}} \left[ \frac{c}{\sqrt{Q}} a_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}} \zeta_2 + h.c. \right], \quad (1a)$$

$$c = 2\pi i e \left( \frac{\hbar\omega_1}{4\pi A\epsilon} \right)^{1/2}, \quad (1b)$$

\* 内蒙古自然科学基金资助的课题。

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon_s^*} - \frac{1}{\epsilon_0^*}, \quad (1c)$$

$$\zeta_Q = e^{-i\beta_1 Q \cdot \rho} - e^{i\beta_2 Q \cdot \rho}, \quad (1d)$$

$$\beta_1 = \frac{m_e}{M}, \beta_2 = \frac{m_h}{M}, M = m_e + m_h, \mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}, \quad (1e)$$

式中  $M$ 、 $\mu$  分别是激子的质心质量和约化质量,  $\rho$  是激子二维的相对坐标矢量,  $\nabla_s^2$  是相应的拉普拉斯算符,  $\omega_s$  是表面光学声子的长波极限频率,  $a_Q^+$  和  $a_Q^-$  是波矢为  $Q$  的表面光学声子的产生算符和湮灭算符,  $e$  是电子电荷的绝对值,  $m_e$  和  $m_h$  分别是电子和空穴的有效质量,  $\beta_1$  和  $\beta_2$  分别是电子和空穴的质量分数,  $A$  为表面积。

作两次么正变换

$$U_1 = \exp \left[ i \left( \mathbf{k} - \sum_Q a_Q^+ a_Q^- \mathbf{Q} \right) \cdot \mathbf{R} \right], \quad (2a)$$

$$U_2 = \exp \left[ \sum_Q a_Q^+ f_Q(\rho) - a_Q^- f_Q^*(\rho) \right], \quad (2b)$$

$$f_Q(\rho) = - \frac{2M}{\hbar^2} \frac{c^* \zeta_Q^*}{Q^{1/2} (Q^2 + u_s^2)}, \quad (2c)$$

$$\frac{\hbar^2 u_s}{2M} = \hbar \omega_s, \quad (2d)$$

则  $\mathcal{H} = U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2$   
 $= \mathcal{H}_{ss}^0 + \mathcal{H}_{es}^0 + \mathcal{H}_{ee}^0 + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2. \quad (3)$

(3)式中各量的意义与文献[5]相同。

我们把哈密顿量中  $(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ss}^0)$  作为未微扰部分, 激子声子体系的未微扰基态波函数为  $\phi_0 \phi(\rho)$ , 其中  $\phi(\rho)$  为归一化的激子波函数,  $\phi_0$  为归一化的没有声子的“真空”声子波函数, 即

$$a_Q \phi_0 = 0, a_Q^+ \phi_0 = \phi(1_Q), \langle \phi_0 / \phi_0 \rangle = 1,$$

其中  $\phi(1_Q)$  为有一个波矢为  $Q$  的声子的波函数。

所以  $\langle \phi^+(\rho) \phi_0 | \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ss}^0 | \phi_0 \phi(\rho) \rangle$   
 $= \langle \phi^+(\rho) | H_{\text{eff}}^0 | \phi(\rho) \rangle.$

而  $H_{\text{eff}}^0$  称为未微扰有效哈密顿量。

$$H_{\text{eff}}^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon_s^* \rho} + \alpha_s \hbar \omega_s \left( 3 + \rho \frac{d}{d\rho} \right) L(\rho) - \frac{\pi}{2} \alpha_s \hbar \omega_s \left( 2 - \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1 \beta_2} \right), \quad (4a)$$

$$L(\rho) = \int_0^{\pi/2} e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (4b)$$

$$\alpha_s = \frac{M e^2}{\hbar^2 u_s \epsilon_s}, \quad (4c)$$

其中  $\alpha_s$  表示激子-表面光学声子耦合参量。

$\mathcal{H}_2$  是由  $H_2^* = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{Q \neq Q'} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}' a_Q^+ a_{Q'}^+, a_Q a_{Q'}$  变换来的，而  $H_2^*$  描写激子发射虚声子时反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用。 $\mathcal{H}_{ex}^2$  的表达式为

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ex}^2 = & \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_Q \frac{Q^2}{(u_i^2 + Q^2)^2} [a_Q^+ a_Q^+ (A_Q^*)^2 + 2a_Q^+ a_Q |A_Q|^2 + a_Q a_Q (A_Q)^2] \\ & + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{Q \neq Q'} \frac{\mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}'}{(u_i^2 + Q^2)^2} (a_Q^+ A_Q^* - a_Q A_Q) (a_{Q'}^+ A_{Q'}^* + a_{Q'} A_{Q'}), \end{aligned} \quad (5a)$$

其中

$$A_Q = \frac{2M}{\hbar^2} \frac{c}{\sqrt{Q}} \cdot (\beta_1 e^{-i\beta_1 Q \cdot s} + \beta_2 e^{i\beta_2 Q \cdot s}). \quad (5b)$$

由上式可以看出， $\mathcal{H}_{ex}^2$  和  $\mathcal{H}_2$  的数量级相同，而  $\mathcal{H}_{ex}^2$  中也含有激子反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用。所以，在考虑激子反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用时，必须把  $(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_{ex}^2 + \mathcal{H}_2)$  作为微扰项进行计算，它引起的一级微扰量为零，其二级微扰量为

$$\begin{aligned} \Delta E = & - \sum_n \frac{|(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_{ex}^2 + \mathcal{H}_2)_{0n}|^2}{E_n - E_0} \\ = & (\Delta E)_1 + (\Delta E)_{ex}^1 + (\Delta E)_{ex}^2 + (\Delta E)_2 + (\Delta E')_1 \\ & + (\Delta E')_2 + (\Delta E')_3 + (\Delta E')_4 + (\Delta E')_5 + (\Delta E')_6, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} (\Delta E)_1 = & - \sum_n \frac{|(\mathcal{H}_1)_{0n}|^2}{E_n - E_0} \\ = & - \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \alpha_i \left[ \frac{\pi}{4} - \sin^2 \varphi_1 \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} - \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \right) L(\rho) \right. \\ & \left. - \frac{\cos 2\varphi_1}{(\rho u_i)^2} \left( \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^3 \frac{d^3}{d\rho^3} - \rho^4 \frac{d^4}{d\rho^4} \right) L(\rho) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} (\Delta E)_{ex}^1 = & - \sum_n \frac{|(\mathcal{H}_{ex}^1)_{0n}|^2}{E_n - E_0} \\ = & - \frac{P^2}{2\mu} \alpha_i \left[ \frac{\pi}{8} \left( \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{\beta_1 \beta_2} \right) + \sin^2 \varphi_2 \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} - \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \right) L(\rho) \right. \\ & \left. + \frac{\cos 2\varphi_2}{(\rho u_i)^2} \left( \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^3 \frac{d^3}{d\rho^3} - \rho^4 \frac{d^4}{d\rho^4} \right) L(\rho) \right], \end{aligned} \quad (8)$$

其中  $\varphi_1, \varphi_2$  是质心动量、内部动量与相对坐标位矢之间的夹角。

$$\begin{aligned} (\Delta E)_{ex}^2 = & - \sum_n \frac{|(\mathcal{H}_{ex}^2)_{0n}|^2}{E_n - E_0} \\ = & - \frac{M \omega_i^2}{2u_i^2} \alpha_i^2 \left[ \frac{\pi^2}{4} \left( \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1 \beta_2} \right)^2 + A(\rho) + B(\rho) \right], \end{aligned} \quad (9a)$$

其中

$$A(\rho) = \left[ \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1 \beta_2} + L_1(\rho) \right) \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1 \beta_2} + \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} \right) \right) \right.$$

$$\left. + \frac{1}{3} \rho^3 \frac{d^3}{d\rho^3} \right) L_1(\rho) \Big) + \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} + L_2(\rho) \right) \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right. \\ \left. + \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{3} \rho^3 \frac{d^3}{d\rho^3} \right) L_2(\rho) \right) \Big] - \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right)^2, \quad (9b)$$

$$B(\rho) = \left[ \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} + \left( 1 + \rho \frac{d}{d\rho} \right) L_1(\rho) \right) \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right. \right. \\ \left. + \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} - \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \right) L_1(\rho) \right) + \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right. \\ \left. + \left( 1 + \rho \frac{d}{d\rho} \right) L_2(\rho) \right) \times \left( \frac{\pi}{4} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right. \\ \left. + \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} - \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \right) L_2(\rho) \right) \Big] - \frac{\pi^2}{8} \left( \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right)^2, \quad (9c)$$

$$L_1(\rho) = \int_0^{\pi/2} e^{-\alpha_1 \rho \cos \varphi} \cos^2 \varphi d\varphi, \quad (9d)$$

$$L_2(\rho) = \int_0^{\pi/2} e^{-\alpha_1 \rho \cos \varphi} \sin^2 \varphi d\varphi, \quad (9e)$$

$$(\Delta E)_1 = - \sum_n' \frac{|(\mathcal{H}_1)_{0n}|^2}{E_n - E_0}, \\ = - \frac{M \omega_1^2}{2\alpha_1^2} \alpha_1^2 \left[ \frac{\pi^2}{4} + C(\rho) + D(\rho) \right], \quad (10a)$$

$$C(\rho) = \left[ \frac{\pi}{4} - L_1(\rho) \right] \left[ \frac{\pi}{4} - \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{3} \rho^3 \frac{d^3}{d\rho^3} \right) L_1(\rho) \right] \\ + \left[ \frac{\pi}{4} - L_2(\rho) \right] \left[ \frac{\pi}{4} - \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{3} \rho^3 \frac{d^3}{d\rho^3} \right) L_2(\rho) \right] - \frac{\pi^2}{8}, \quad (10b)$$

$$D(\rho) = \left[ \frac{\pi}{4} - \left( 1 + \rho \frac{d}{d\rho} \right) L_1(\rho) \right] \left[ \frac{\pi}{4} - \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} \right. \right. \\ \left. \left. - \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \right) L_1(\rho) \right] + \left[ \frac{\pi}{4} - \left( 1 + \rho \frac{d}{d\rho} \right) L_2(\rho) \right] \left[ \frac{\pi}{4} \right. \\ \left. - \left( 1 - \rho \frac{d}{d\rho} - \rho^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \right) L_2(\rho) \right] - \frac{\pi^2}{8}, \quad (10c)$$

$$(\Delta E')_1 = - \sum_n' \frac{(\mathcal{H}_1^1)_{0n} (\mathcal{H}_1^1)_{0n}^* + (\mathcal{H}_1^1)_{0n} (\mathcal{H}_{ex}^1)_{0n}^*}{E_n - E_0} = 0, \quad (11a)$$

$$(\Delta E')_2 = - \sum_n' \frac{(\mathcal{H}_1^1)_{0n} (\mathcal{H}_2^1)_{0n}^* + (\mathcal{H}_2^1)_{0n} (\mathcal{H}_1^1)_{0n}^*}{E_n - E_0} = 0, \quad (11b)$$

$$(\Delta E')_3 = - \sum_n' \frac{(\mathcal{H}_1^2)_{0n} (\mathcal{H}_{ex}^2)_{0n}^* + (\mathcal{H}_{ex}^2)_{0n} (\mathcal{H}_1^2)_{0n}^*}{E_n - E_0} = 0, \quad (11c)$$

$$(\Delta E')_4 = - \sum_n' \frac{(\mathcal{H}_{ex}^1)_{0n} (\mathcal{H}_2)_{0n}^* + (\mathcal{H}_2)_{0n} (\mathcal{H}_{ex}^1)_{0n}^*}{E_n - E_0} = 0, \quad (11d)$$

$$(\Delta E')_5 = - \sum_n' \frac{(\mathcal{H}_{ex}^1)_{0n} (\mathcal{H}_{ex}^2)_{0n}^* + (\mathcal{H}_{ex}^2)_{0n} (\mathcal{H}_{ex}^1)_{0n}^*}{E_n - E_0} = 0, \quad (11e)$$

$$\begin{aligned} (\Delta E')_6 &= - \sum_n' \frac{(\mathcal{H}_2)_{0n} (\mathcal{H}_2)_{0n}^* + (\mathcal{H}_2)_{0n} (\mathcal{H}_{ex}^2)_{0n}^*}{E_n - E_0} \\ &= - \frac{M\omega_i^2}{2\mu_i^2} \alpha_i^2 \frac{(\beta_1 - \beta_2)^2}{2\beta_1\beta_2} \left[ \frac{\pi^2}{4} + c(\rho) + D(\rho) \right]. \end{aligned} \quad (11f)$$

在上述诸微扰项中,  $(\Delta E)_1$  和  $(\Delta E)_{ex}^1$  是忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用的附加能量, 这些附加能量与耦合参量  $\alpha_i$  成比例,  $(\Delta E)_2$ ,  $(\Delta E)_{ex}^2$  和  $(\Delta E')_6$  是由于反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用所引起的附加能量, 它与耦合参量  $\alpha_i^2$  成比例。考虑二级微扰能, 最后求得表面激子的有效哈密顿量

$$\begin{aligned} H_{eff} &= H_{eff}^0 + \Delta E \\ &= \frac{\hbar^2 K^2}{2M^*} + \frac{P^2}{2\mu^*} - \frac{e^2}{\epsilon_\infty^* \rho} + V_s(\rho) - E_{tr}, \end{aligned} \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} V_s(\rho) &= \alpha_i \hbar \omega_i \left( 3 + \rho \frac{d}{d\rho} \right) L(\rho) \\ &\quad - \frac{\alpha_i^2 \hbar \omega_i}{4} \left[ A(\rho) + B(\rho) + \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} (C(\rho) + D(\rho)) \right], \end{aligned} \quad (12b)$$

$$E_{tr} = \frac{\pi}{2} \alpha_i \hbar \omega_i \left( 2 - \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right) + \frac{\pi^2}{16} \alpha_i^2 \hbar \omega_i \frac{(\beta_1^2 + \beta_2^2)^2}{\beta_1^2 \beta_2^2}, \quad (12c)$$

其中  $M^*$  和  $\mu^*$  是表面激子的重正化质心和约化质量, 其表达式与[6]相同。 $V_s(\rho)$  为表面光学声子诱生的屏蔽势,  $E_{tr}$  为表面激子的目陷能。由 (12b) 和 (12c) 可以看出, 它们的第一项与  $\alpha_i$  成比例表示忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用所贡献的, 而第二项与  $\alpha_i^2$  成比例的是由于反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用所引起的附加能量。

### 三、结果和讨论

#### (1) 屏蔽势

由于电子和空穴与表面光学声子的相互作用而在电子和空穴间诱生的相互作用势  $V_s(\rho)$  总是大于零的, 因此起屏蔽作用, 其表达式为

$$\begin{aligned} V_s(\rho) &= \alpha_i \hbar \omega_i \left( 3 + \rho \frac{d}{d\rho} \right) L(\rho) - \alpha_i^2 \hbar \omega_i \left[ \frac{1}{4} A(\rho) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{4} B(\rho) + \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{8\beta_1\beta_2} (C(\rho) + D(\rho)) \right] \\ &= \alpha_i \hbar \omega_i f_1 - \frac{\alpha_i^2 \hbar \omega_i}{4\beta_1\beta_2} T(\rho), \end{aligned} \quad (13a)$$

其中

$$f_1 = \int_0^{\pi/2} (3 - \rho u_s \cos \varphi) e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (13b)$$

$$T(\rho) = f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8, \quad (13c)$$

$$f_2 = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} \cos^2 \varphi e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (13d)$$

$$f_3 = \int_0^{\pi/2} \left[ \cos^2 \varphi + \rho u_s \cos^3 \varphi - \frac{1}{3} (\rho u_s)^3 \cos^5 \varphi \right] e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (13e)$$

$$f_4 = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} \sin^2 \varphi e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi \quad (13f)$$

$$f_5 = \int_0^{\pi/2} \sin^2 \varphi \left[ 1 + \rho u_s \cos \varphi - \frac{1}{3} (\rho u_s)^3 \cos^3 \varphi \right] e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (13g)$$

$$f_6 = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} (\cos^2 \varphi - \rho u_s \cos^3 \varphi) e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (13h)$$

$$f_7 = \int_0^{\pi/2} [\cos^2 \varphi + \rho u_s \cos^3 \varphi - (\rho u_s)^2 \cos^4 \varphi] e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (13i)$$

$$f_8 = \frac{1}{2} \int_0^{\pi/2} (\sin^2 \varphi - \rho u_s \sin^2 \varphi \cos \varphi) e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi, \quad (13j)$$

$$f_9 = \int_0^{\pi/2} \sin^2 \varphi [1 + \rho u_s \cos \varphi - (\rho u_s)^2 \cos^2 \varphi] e^{-u_s \rho \cos \varphi} d\varphi. \quad (13k)$$

(13a) 中第一项是忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用时的诱生势，第二项是由于反冲效应中不同波矢的声子间相互作用对诱生势附加部分，为了比较二者的大小，对函数  $f_1$  和  $T(\rho)$  作数值计算，其结果如图 1 所示。

由图 1 可以看出，随着  $\rho$  的增加或减少，则函数  $f_1, T(\rho)$  的值也将减少或增加。当  $\rho u_s > 5$  时， $T(\rho) \approx 0$ ，

$$f_1 \approx \frac{2}{\rho u_s},$$

即声子之间的相互耦合项可以忽略，因此，对于 Wannier 激子，只需考虑声子与激子之间的耦合项，即

$$V_s(\rho) = \left( \frac{1}{\varepsilon_s^*} - \frac{1}{\varepsilon_0^*} \right) \frac{e^2}{\rho}. \quad (14a)$$

加上屏蔽的电子空穴间的相互作用势为

$$\begin{aligned} -\frac{e^2}{\varepsilon_s^* \rho} + V_s(\rho) &= -\frac{e^2}{\varepsilon_0^* \rho}, \\ &= -\frac{1}{(\varepsilon_s + 1)/2} \frac{e^2}{\rho}. \end{aligned} \quad (14b)$$

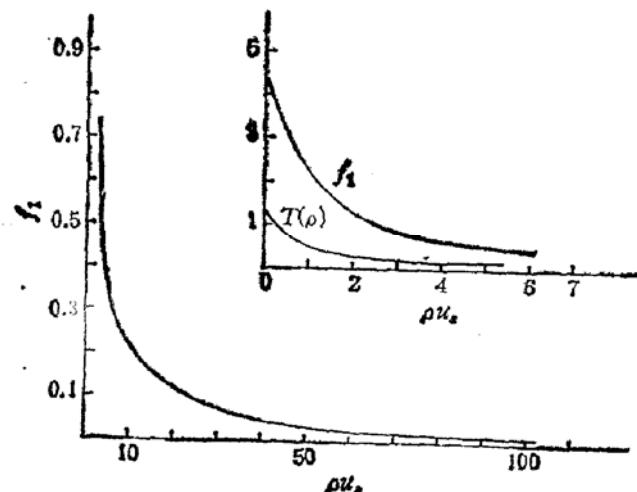


图 1 函数  $f_1, T(\rho)$  和电子空穴间的距离  $\rho$  的关系

因此，有效作用势为库仑型的。

### (2) 自陷能和自陷条件

激子与表面光学声子相互作用而诱发的自陷能为(12c)，激子的自陷条件是  $E_s > 0$ ，即

$$(\beta_1\beta_2)^2 - (0.1667 + 0.0654\alpha_s)\beta_1\beta_2 + 0.0328\alpha_s > 0. \quad (15)$$

由上二次不等式解法可知，当  $0.2575 < \alpha_s < 25.305$  时， $\beta_1\beta_2$  取任意值时，激子都自陷。

在  $0 < \alpha_s < 0.2575$  或  $\alpha_s > 25.305$  时有

$$\beta_1\beta_2 > C, \beta_1\beta_2 < D, \quad (16a)$$

其中

$$C = \frac{0.1667 + 0.0654\alpha_s + \sqrt{0.0278 + 4.28 \times 10^{-3}\alpha_s^2 - 0.1094\alpha_s}}{2}, \quad (16b)$$

$$D = \frac{0.1667 + 0.0654\alpha_s - \sqrt{0.0278 + 4.28 \times 10^{-3}\alpha_s^2 - 0.1094\alpha_s}}{2}. \quad (16c)$$

因为  $\beta_1 + \beta_2 = 1$ ，所以  $\beta_1\beta_2$  的最大值为 0.25，即

$$0 < \beta_1\beta_2 \leq 0.25, \quad (17a)$$

所以

$$C < \beta_1\beta_2 \leq 0.25, \quad (17b)$$

$$0 < \beta_1\beta_2 < D. \quad (17c)$$

解上各方程最后得出，在  $0 < \alpha_s < 0.2575$  时，当

$$\beta_1 < \beta'_1, \beta_1^{(0)} < \beta_1 < \beta_1^{(1)}, \beta_1 > \beta''_1, \quad (18a)$$

激子自陷，其中

$$\beta'_1 = \frac{1 - \sqrt{1 - 4D}}{2}, \beta_1^{(0)} = \frac{1 - \sqrt{1 - 4C}}{2}, \quad (18b)$$

$$\beta_1^{(1)} = \frac{1 + \sqrt{1 - 4C}}{2}, \beta''_1 = \frac{1 + \sqrt{1 - 4D}}{2}. \quad (18c)$$

在  $\alpha_s > 0.2575$  时， $\beta_1\beta_2$  取任意值，激子自陷。

综上所述，激子的自陷条件是当  $0 < \alpha_s < 0.2575$  时  $0 < \beta_1 < \beta'_1, \beta_1^{(0)} < \beta_1 < \beta_1^{(1)}, \beta''_1 < \beta_1 < 1$ ，为自陷区，如图 2 所示，

随着  $\alpha_s$  值的减少， $\beta'_1$  与  $\beta_1^{(0)}$ 、 $\beta_1^{(1)}$  与  $\beta''_1$  的间隔增大，当  $\alpha_s$  趋于零时，其自陷区与不考虑反冲效应中不同波矢的声子之

间的相互作用时一致，即  $0.2113 < \beta_1 < 0.7886$ 。当  $\alpha_s = 0.2575$  时， $\beta_1^{(0)} = \beta'_1, \beta_1^{(1)} = \beta''_1$  整个区域连在一起，即当  $\alpha_s \geq 0.2575$  时，对于任意的  $\beta_1$  值，激子均自陷。

下面比较考虑反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用时附加的自陷能

$$E_2 = \frac{\pi^2}{64} \alpha_s^2 \hbar \omega_s \frac{(\beta_1^2 + \beta_2^2)^2}{\beta_1^2 \beta_2^2}$$

与没有考虑这种过程的自陷能

$$E_1 = \frac{\pi}{2} \alpha_s \hbar \omega_s \left( 2 - \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1 \beta_2} \right)$$

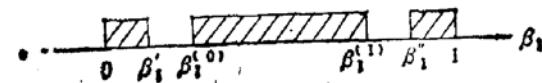


图 2 激子的自陷区  $0 < \alpha_s < 0.2575$

的量值关系,二者之比为

$$\frac{E_2}{E_1} = \frac{\pi}{32} \frac{(\beta_1^2 + \beta_2^2)^2}{\beta_1 \beta_2 \left[ \beta_1 \beta_2 - \frac{(\beta_1 - \beta_2)^2}{2} \right]} \alpha_s.$$

能量之比  $E_2/E_1$  以  $\frac{\pi}{32} \alpha_s$  为单位,通过计算可以得出  $E_2/E_1$  与  $\beta_1$  的关系曲线示于图 3 中。

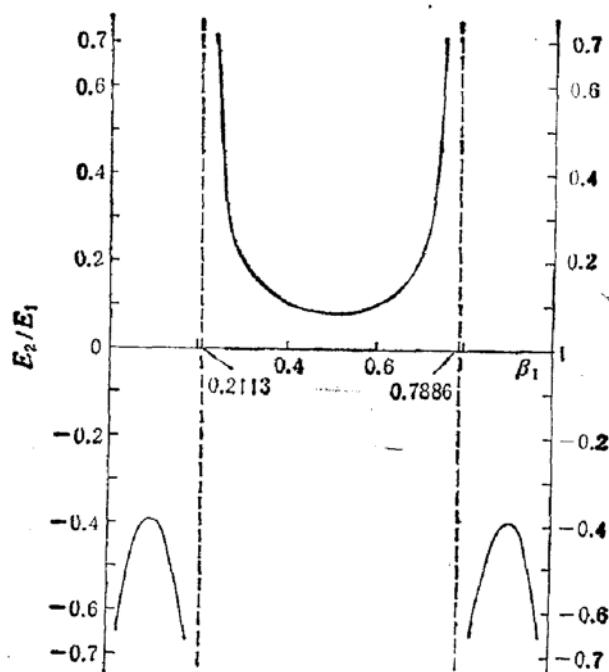


图 3  $E_2/E_1$  与  $\beta_1$  的关系

由图可以看出,  $\beta_1$  在  $0, 0.2113, 0.7886, 1$  附近,  $E_2 \gg E_1$ , 即考虑反冲效应中发射的不同波矢的声子之间相互作用所附加的自陷起主要作用。  $\beta_1$  取其他值时,  $E_2/E_1$  的量值的大小与表面激子与声子的耦合强度有关。如  $\alpha_s = 0.1$ , 当  $\beta_1 = 0.5$  时,  $E_2/E_1 = 8\%$ , 当  $\beta_1 = 0.4$  时,  $E_2/E_1 = 10\%$ , 当  $\beta_1 = 0.3$ ,  $E_2/E_1 = 20\%$ 。由此可见, 激子在反冲效应中发射的不同波矢的声子之间的相互作用对自陷能的影响是不可忽略的。

### 参 考 文 献

- [1] A. I. Bobrysheva, V. T. Zyukov and S. I. Beryl, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 101, 69(1980).
- [2] 顾世渝、张杰, 应用科学学报, 3, 189(1985).
- [3] Jing-Lin Xiao, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 165, 449(1991).
- [4] X. X. Liang and S. W. Gu, *Solid State Commun.*, 50, 505(1984).
- [5] 梁希侠, 自然杂志, 5, 154(1982)、内蒙古大学学报, 13, 167(1982).
- [6] 梁希侠, 半导体学报, 4, 209(1983).

## Properties of Surface Exciton in Polar Semiconductors

Sun Baoquan and Xiao Jinglin

NeiMongol National Teacher's College, Tongliao 028043

(Received 8 October 1991; revised manuscript received 24 February 1992)

### Abstract

Some properties of the surface exciton in polar semiconductors are studied. The effective Hamiltonian of the surface exciton is derived by a perturbation method. When we consider the interaction between phonons of different wave vector in the recoil process, the influence on effective potential between the electron and the hole, the self-trapping energy and the self-trapping condition are discussed.

**PACC:** 7135, 7320, 6550