

CdF₂ 半导体中表面磁极化子的性质*

肖景林 额尔敦朝鲁 张 鹏

(内蒙古民族师院物理系 通辽 028043)
(中国科学院激发态物理开放实验室 长春 130021)

摘要 本文讨论电子和表面光学声子耦合强、与体纵光学声子耦合弱时对 CdF₂ 半导体表面磁极化子性质的影响。采用线性组合算符法和微扰法导出了 CdF₂ 半导体中表面磁极化子的有效哈密顿量。在计及电子在反冲效应中发射和吸收不同波矢的声子之间的相互作用时, 讨论了对 CdF₂ 半导体中表面磁极化子性质的影响。对 CdF₂ 半导体进行数值计算, 结果表明, CdF₂ 半导体中表面磁极化子的振动频率 λ 和诱导势 V_i^s 随坐标 z 的增加而减小, 随磁场 B 的增加而增加; 诱导势 V_i^b 随坐标 z 的增加而增加, 但与外磁场 B 无关; 有效势 V_{eff} 随坐标 z 和磁场 B 的增加而增加; 当 $z < 3\text{nm}$ 时, 声子之间相互作用的影响 Δ 随坐标 z 的增加而增加, 当 $z > 3\text{nm}$ 时, Δ 随 z 的增加而缓慢减小。

PACC: 7138, 7320

1 引言

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。在表面磁极化子的研究工作中, 人们不仅考虑电子与体纵光学(LO)声子相互作用, 还包括电子与表面光学(SO)或界面光学(ID)声子相互作用。Larsen 采用了一种新颖的四级微扰法^[1]计算了磁场中二维极化子的基态能量。顾世洧等^[2]用这种方法研究了在半导体量子阱中的磁极化子。稍后 O'sorio 等^[3]最先报道了在 GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs 量子阱结构中共振施主杂质磁极化子的理论计算。Ze Hu 等^[4]用 Haga 微扰法导出了在零温下交界面磁极化子的有效哈密顿量。Wei Bao-Hua 等^[5, 6]利用格林函数法讨论和体纵光学声子、交界面光学声子相互作用的交界面磁极化子的诱导势和自能。

事实上, 到目前为止, 对磁场中的表面极化子的研究, 均忽略其反冲效应中发射和吸收的不同波矢的声子之间的相互作用的近似下进行计算, 考虑相应的相互作用对表面磁极化子性质的影响的研究甚少。肖景林等^[7, 8]在考虑相应的相互作用时用微扰法讨论了表面极化

* 中国科学院激发态物理开放实验室基金资助课题

肖景林 男, 1939 年出生, 教授, 目前主要从事晶体和半导体表面、界面物理研究

额尔敦朝鲁 男, 1959 年出生, 副教授, 目前主要从事晶体和半导体表面激子和极化子的研究

张 鹏 女, 1964 年出生, 讲师, 目前主要从事晶体和半导体表面激子和极化子的研究

1998-01-22 收到, 1998-12-15 定稿

子和表面磁极化子的性质 有不少的半导体, 电子与 SO 声子耦合强, 与 LO 声子耦合弱^[9, 10]. 本文计及电子在反冲效应中发射和吸收不同波矢的声子之间的相互作用时, 用线性组合算符法和微扰法研究其对 CdF₂ 半导体中与 SO 声子耦合强, 与 LO 声子耦合弱的表面磁极化子性质的影响

2 哈密顿量

设 CdF₂ 半导体表面位于 $x-y$ 平面内, 表面法线方向在 z 轴上 在 $z > 0$ 的半无限空间里充满着 CdF₂ 半导体, $z < 0$ 的半无限空间是真空, 半导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 在磁场中, CdF₂ 半导体内电子-声子系的哈密顿量可以写成

$$H = \frac{1}{2m} \left[P_x^2 + \frac{\beta^2}{4} y^2 \right] + \frac{1}{2m} \left[P_y^2 + \frac{\beta^2}{4} x^2 \right] + \frac{P_z^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon - 1)}{4\pi\epsilon\epsilon_0(\epsilon + 1)} + \int_{\vec{Q}} \bar{h}\omega b_Q^+ b_Q^- + \int_{\vec{W}} \bar{h}\omega a_W^+ a_W^- + \int_{\vec{Q}} [e^{-Qz} (V_Q^* e^{-\vec{Q} \cdot \vec{P}} b_Q^+ + H.C.) + \int_{\vec{W}} \sin(Wz) (V_W^* e^{-\vec{W} \cdot \vec{P}} a_W^+ + H.C.)] \quad (1a)$$

其中

$$V_Q^* = i \left(\frac{4\pi e^2 \bar{h} \omega}{\epsilon' S Q} \right)^{1/2}, V_W^* = i \left(\frac{4\pi e^2 \bar{h} \omega}{\epsilon' W^2} \right)^{1/2}, \frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{\epsilon_0}, \frac{1}{\epsilon'} = \frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_0 + 1} - \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \quad (1b)$$

哈密顿量 H 中, 第 1、2 和第 3 项是电子在 x 、 y 和 z 方向的动能, 第 4 项是镜像势, 第 5 和第 6 项是 SO 声子和 LO 声子的能量, 第 7 和第 8 项是电子与 SO 声子和 LO 声子的相互作用的能量 ω_s 和 ω_l 是 CdF₂ 半导体中 SO 声子和 LO 声子的频率, a_W^+ (a_W^-) 是波矢为 \vec{W} (在 $x-y$ 平面内的分量为 \vec{W}) 的 LO 声子的产生(湮灭)算符, b_Q^+ (b_Q^-) 是二维波矢为 \vec{Q} 的 SO 声子的产生(湮灭)算符, $\epsilon(\epsilon')$ 是 CdF₂ 半导体静态(高频)介电常数, S 和 V 是半导体体的表面积和体积

首先把哈密顿量分成平行于半导体表面的分量 $H_{||}$ 和垂直于半导体表面的分量 H_{\perp}

$$H_{||} = H_x + H_y \quad (2a)$$

$$H_{\perp} = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{e^2(\epsilon - 1)}{4\pi\epsilon\epsilon_0(\epsilon + 1)} \quad (2b)$$

其余部分为 H_{\perp} . 在绝热近似下, 处理 $x-y$ 平面内运动时, 将 z 看成参量 对电子的横向运动的动量和坐标引进线性组合算符

$$P_j = \left(\frac{m\bar{h}\lambda}{2} \right)^{1/2} (B_j + B_j^+), \quad \rho_j = i \left(\frac{\bar{h}}{2m\lambda} \right)^{1/2} (B_j - B_j^+), \quad j = x, y \quad (3)$$

其中 λ 为极化子的振动频率^[11], 取其为变分参量

$$\text{作两次么正变换} \quad U_1 = \exp \left[-i \int_{\vec{W}} a_W^+ a_W^- \vec{W} \cdot \vec{\rho} \right] \\ U_2 = \exp \left[\int_{\vec{Q}} (a_Q^+ f_w - a_Q^- f_w^*) + \int_{\vec{Q}} (b_Q^+ g_Q - b_Q^- g_Q^*) \right] \quad (4a)$$

其中参数 f_w 和 g_Q 取为^[12]

$$f_w = - \frac{V_w^* \sin(Wz)}{\bar{h}\omega + \frac{\bar{h}^2 W^2}{2m}}, \quad g_Q = - \frac{V_Q^* e^{-Qz}}{\bar{h}\omega} \exp \left(- \frac{\bar{h}Q^2}{4m\lambda} \right) \quad (4b)$$

得到

$$U_2^{-1}U_1^{-1}H - U_1U_2 = H^0 + H' \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} H^0 &= \frac{\bar{h}\lambda}{4} \left[(B_x + B_x^+)^2 + (B_y + B_y^+)^2 \right] - \frac{\beta^2 \bar{h}}{64n^2 \lambda} \left[(B_x - B_x^+)^2 + (B_y - B_y^+)^2 \right] \\ &+ \frac{\bar{h}\omega}{\bar{w}} \left(\bar{h}\omega + \frac{\bar{h}^2 W^2}{2m} \right) (a_w^\pm + f_w^*) (a_w^- + f_w) + \frac{\bar{h}\omega}{\bar{q}} (b_q^\pm + g_q^*) (b_q^- + g_q) \\ &+ \frac{\sin(W_z z)}{\bar{w}} \left[V_w^* (a_w^\pm + f_w^*) + HC \right] + \frac{V_o^* e^{-Qz}}{\bar{q}} (b_q^\pm + g_q^*) \\ &\times \exp \left[- \frac{\bar{h}Q^2}{4n\lambda} \right] \exp \left[- \left(\frac{\bar{h}}{2m\lambda} \right)^{1/2} Q B_j^+ \right] \exp \left[\left(\frac{\bar{h}}{2m\lambda} \right)^{1/2} Q B_j^- \right] + HC \\ &+ \frac{1}{m} \left\{ - \left(\frac{m\bar{h}\lambda}{2} \right)^{1/2} \left[(B_x + B_x^+) \frac{(a_w^\pm + f_w^*) (a_w^- + f_w) \bar{h}W_x + (B_y + B_y^+)}{\bar{w}} \right. \right. \\ &\times \left. \left. (a_w^\pm + f_w^*) (a_w^- + f_w) \bar{h}W_y \right] - i \frac{\bar{h}\beta^2}{8} \left[(B_x + B_x^+) (B_y - B_y^+) \right. \right. \\ &- (B_y + B_y^+) (B_x - B_x^+) \left. \left. \right] + i \frac{\beta^2}{4} \left(\frac{\bar{h}}{2m\lambda} \right)^{1/2} \left[(B_y - B_y^+) \frac{(a_w^\pm + f_w^*) (a_w^- + f_w) \bar{h}W_y}{\bar{w}} \right. \right. \\ &\times \left. \left. (a_w^- + f_w) \bar{h}W_x - (B_x - B_x^+) \frac{(a_w^\pm + f_w^*) (a_w^- + f_w) \bar{h}W_y}{\bar{w}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5b)$$

$$H' = \frac{\bar{h}^2}{2n\bar{w}} (a_w^\pm + f_w^*) (a_w^- + f_w) (a_w^\pm + f_w^*) (a_w^- + f_w) \vec{W} \cdot \vec{W}, \quad (5c)$$

其中 H' 是电子在反冲效应中发射和吸收不同波矢声子之间的相互作用所引起的附加能量

选取 H^0 的本征波函数为 $|\Phi\rangle = |\varphi(\rho)\rangle |0\rangle_B |0\rangle_b |n\rangle_a$, 其基态波函数为 $|\Phi\rangle = |\varphi(\rho)\rangle |0\rangle_B |0\rangle_b |0\rangle_a$, $|\varphi(\rho)\rangle$ 为表面电子的波函数, $|0\rangle_B$ 表示 B 算符的真空态, $|0\rangle_b$ 表示零 SO 声子态, $|n\rangle_b$ 表示第 n 个 LO 声子态, $|0\rangle_a$ 为零 LO 声子态 计算

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^0 = {}_B < 0 | H^0 | 0 \rangle_B &= \frac{\bar{h}\lambda}{2} + \frac{\bar{h}\omega^2}{8\lambda} + \frac{\bar{h}\omega}{\bar{w}} \left(\bar{h}\omega + \frac{\bar{h}^2 W^2}{2m} \right) a_w^\pm a_w^- + \frac{\bar{h}\omega b_q^\pm b_q^-}{\bar{q}} \\ &- \frac{|V_w|^2 \sin^2(W_z z)}{\bar{h}\omega + \frac{\bar{h}^2 W^2}{2m}} - \frac{|V_o|^2 e^{-Qz}}{\bar{h}\omega} \exp \left(- \frac{\bar{h}Q^2}{2m\lambda} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

\mathbf{H}^0 的本征值为

$$\begin{aligned} E^{(n)}(\lambda) &= \frac{\bar{h}\lambda}{2} + \frac{\bar{h}\omega^2}{8\lambda} + \frac{\bar{h}\omega}{\bar{w}} \left(\bar{h}\omega + \frac{\bar{h}^2 W^2}{2m} \right) n - \alpha \bar{h}\omega \left[\frac{\pi}{2} - f_1(z) \right] \\ &- \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha \bar{h}\omega \left(\frac{\lambda}{\omega} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{\lambda}{\omega} u_L^2 z^2 \right) \operatorname{erfc} \left[\left(\frac{\lambda}{\omega} \right)^{1/2} u_L z \right] \end{aligned} \quad (7a)$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{me^2}{\bar{e}h^2 u_L}, \quad \alpha_s = \frac{me^2}{\bar{e}h^2 u_S}, \quad \beta^2 = \frac{2eB}{c}, \quad \omega = \frac{eB}{mc} \\ \bar{h}\omega &= \frac{\bar{h}^2 u_L^2}{2m}, \quad \bar{h}\omega_s = \frac{\bar{h}^2 u_S^2}{2m}, \quad f_1(z) = \frac{\exp(-2u_L z x)}{1+x^2} dx \end{aligned} \quad (7b)$$

$E^{(n)}(\lambda)$ 对 λ 的变分可得 CdF₂ 半导体表面磁极化子的振动频率 λ

$$\lambda = \left\{ \frac{\omega^2}{4} + \frac{\sqrt{-\pi}}{2} \alpha \sqrt{\omega} \lambda^{3/2} \exp\left(\frac{\lambda}{\omega} u_{sz}^2\right) \operatorname{erfc}\left[\left(\frac{\lambda}{\omega}\right)^{1/2} u_{sz}\right] - 2\alpha \sqrt{\omega} u_{sz} \left(\frac{\omega}{\lambda}\right)^{1/2} \lambda^2 \int_0^x \exp\left(-x^2 - 2\left(\frac{\lambda}{\omega}\right)^{1/2} u_{sz} x\right) dx \right\}^{1/2} \quad (8)$$

3 微扰计算

我们把哈密顿量中 \mathbf{H}^0 作为未扰部分, 把 H' 作为微扰项进行计算, 它引起的一级修正为零, 其二级修正为

$$E' = - \frac{\left| (H')_{0n} \right|^2}{E^{(n)} - E^{(0)}} = - \alpha^2 \bar{\omega} f_2(z) \quad (9a)$$

$$f_2(z) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{x^2 y^2 [1 - \exp(-2u_{sz}x)] [1 - \exp(-2u_{sz}y)]}{(1+x^2)^2 (1+y^2)^2 (2+x^2+y^2)} dx dy \quad (9b)$$

(9a) 是考虑了反冲效应中发射和吸收不同波矢的声子之间的相互作用时对 CdF_2 半导体表面磁极化子的诱生势的附加贡献。它与耦合常数 α^2 成正比。考虑二级微扰能量, 最后求得磁场中 CdF_2 半导体表面极化子的有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = \frac{P^2}{2m} + \frac{\bar{h}\lambda}{2} + \frac{\bar{h}\omega^2}{8\lambda} + V_{\text{ing}} + V_i^b + V_i^s \quad (10a)$$

其中

$$\begin{aligned} V_{\text{ing}} &= \frac{e^2 (\epsilon - 1)}{4\pi \epsilon (\epsilon + 1)} \\ V_i^b &= - \alpha \bar{\omega} \left[\frac{\pi}{2} - f_1(z) \right] - \alpha^2 \bar{\omega} f_2(z) \\ V_i^s &= - \frac{\sqrt{-\pi}}{2} \alpha \bar{\omega} \left(\frac{\lambda}{\omega} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{\lambda}{\omega} u_{sz}^2\right) \operatorname{erfc}\left[\left(\frac{\lambda}{\omega}\right)^{1/2} u_{sz}\right] \end{aligned} \quad (10b)$$

分别是 CdF_2 半导体的像势, 电子-LO 声子相互作用所产生的诱生势以及电子-SO 声子相互作用所产生的诱生势。 CdF_2 半导体表面磁极化子的有效势为

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ing}} + V_i^b + V_i^s \quad (10e)$$

显然, CdF_2 半导体的表面磁极化子的诱生势和有效势与反冲效应中发射和吸收不同波矢的声子之间的相互作用和磁场都有关。

4 结果与讨论

为了更清楚地说明外磁场和反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用对表面磁极化子的性质的影响, 以 CdF_2 半导体为例进行了数值计算。计算中所采用的材料的参数和耦合常数^[13]列于表 1, 数值结果分别示于图 1 至 4。

表 1 CdF₂ 半导体的参数和耦合常数

ϵ_0	ϵ	$\bar{h}\omega / \text{meV}$	$\bar{h}\omega / \text{meV}$	α_L	α_S	m / m_e
7.78	2.40	50.04	44.69	3.2	4.23	0.45

图 1 表示 CdF₂ 半导体中的表面磁极化子的振动频率 λ 在不同的磁场 B 下与坐标 z 的关系曲线。可以看出, 表面磁极化子的振动频率 λ 随坐标 z 的增加而减小, 随磁场 B 的增加而增加。图 2 和图 3 描绘了 CdF₂ 半导体中, 当计及在反冲效应中发射和吸收不同波矢的声子之间的相互作用时, 表面磁极化子的诱生势和有效势与坐标 z 和磁场 B 的关系曲线。可以看出, 诱生势 V_i^s 的大小在表面附近最大, 且随坐标 z 的增加而减小, 随磁场 B 的增加而增加。诱生势 V_i^b 在表面最小, 且随坐标 z 的增加而增加, 但与磁场 B 无关。有效势 V_{eff} 随坐标 z 和磁场 B 的增加而增加。

相应的相互作用只对电子-LO 声子相互作用所产生的诱生势 V_i^b 有影响。下面比较考虑这种相互作用时附加的诱生势

$$V_{i2}^b = -\alpha_L^2 \bar{h}\omega f_2(z) \quad (12a)$$

与没有考虑这种作用的诱生势

$$V_{i1}^b = -\alpha_L \bar{h}\omega \left[\frac{\pi}{2} - f_1(z) \right] \quad (12b)$$

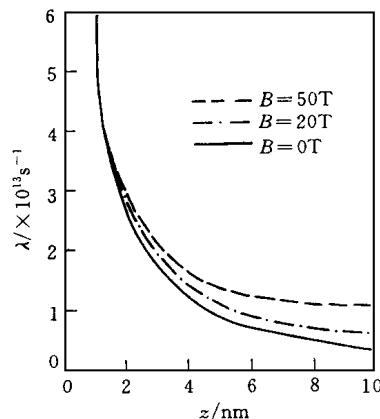


图 1 CdF₂ 半导体中表面磁极化子的振动频率 λ 在不同的磁场 B 下和坐标 z 的关系曲线

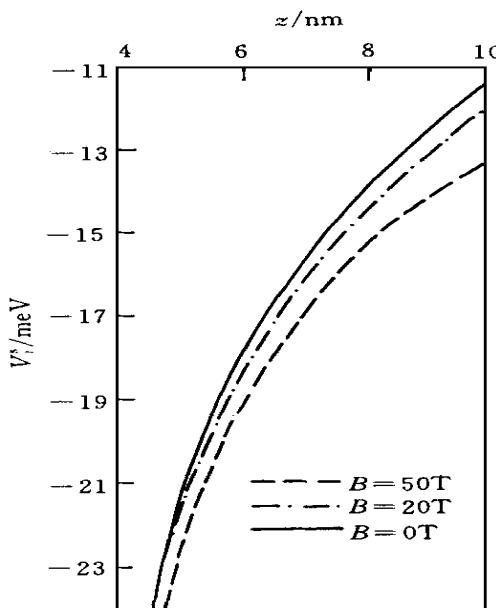


图 2 CdF₂ 半导体中表面磁极化子的诱生势 V_i^s 在不同的磁场 B 下与坐标 z 的关系曲线

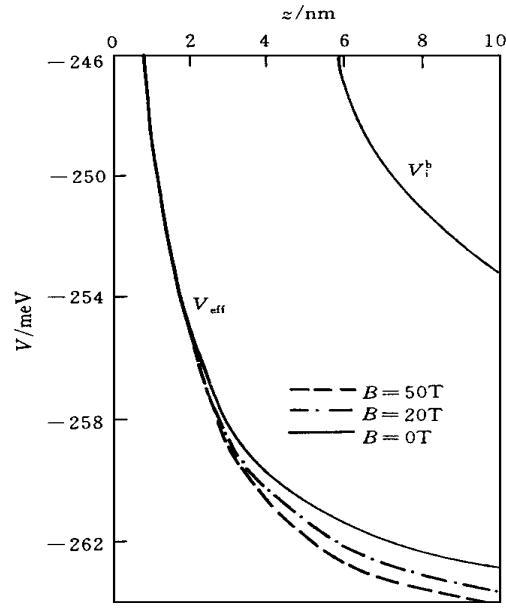


图 3 极化子的诱生势 V_i^b 和有效势 V_{eff} 在不同的磁场 B 下与坐标 z 的关系曲线

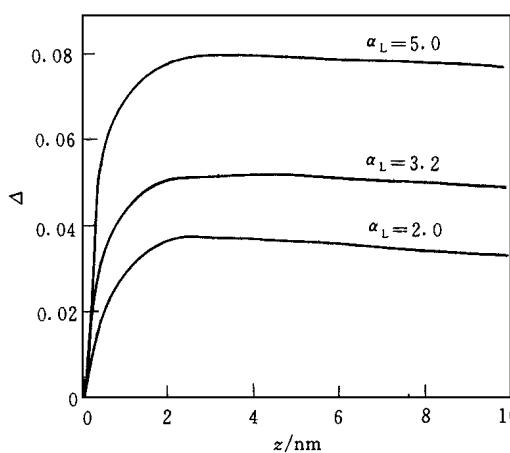


图 4 声子之间相互作用的影响 Δ 与坐标 z 和耦合常数 α 的关系曲线

的量值关系,二者之比

$$\Delta = \frac{V_{\text{p}}^{\text{b}}}{V_{\text{ii}}^{\text{b}}} = \alpha \frac{f_2(z)}{\frac{\pi}{2} - f_1(z)} \quad (12c)$$

图 4 描绘了声子之间相互作用的影响 Δ 与坐标 z 和耦合常数 α 的关系曲线。由图 4 可以看出,当 $z < 3\text{nm}$ 时, Δ 随坐标 z 的增大而较快增加,当 $z > 3\text{nm}$ 时, Δ 随坐标 z 的增大而缓慢减小。另外,声子之间相互作用的影响 Δ 随耦合常数 α 的增加而增加,当耦合常数由 $\alpha = 2.0$ 到 $\alpha = 5.0$ 时, Δ 由 $\Delta = 3.3\%$ 增加到 $\Delta = 8.0\%$ 。

参 考 文 献

- [1] D. M. Larsen, Phys Rev., 1986, **B33**: 799.
- [2] Kong X. J., Wei C. W., Gu S. W., Phys Rev., 1989, **B39**: 3230.
- [3] F. A. P. Osorio, M. Z. Maialle, O. Hipolito, Solid State Commun., 1991, **80**: 567.
- [4] Ze Hu *et al*, J. Phys Condens Matter, 1992, **4**: 5087.
- [5] Wei B. H., Yu K. W., Ou F. J., J. Phys Condens Matter, 1994, **6**: 1893.
- [6] Wei B. H., Yu K. W., J. Phys Condens Matter, 1995, **7**: 1059.
- [7] Xiao J. L., Xing T. H., Sun B. Q. *et al*, Phys Stat Sol(B), 1994, **183**: 425; Xiao J. L., Xiao W., J. Phys Condens Matter, 1997, **9**: 10567.
- [8] 张鹏, 肖景林, 红外与毫米波学报, 1997, **16**(2): 157.
- [9] Sun B. Q., Xiao W., Xiao J. L., J. Phys Condens Matter, 1994, **6**: 8167.
- [10] 肖玮, 孙宝权, 肖景林, 发光学报, 1993, **14**(2): 253.
- [11] 周世勋, 量子力学教程, 北京: 高等教育出版社, 1991, 124.
- [12] Wei Xiao, Bao-Qian Sun, Jing-Lin Xiao, J. Phys Condens Matter, 1996, **8**: 535.
- [13] E. Kartheuser, Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors, North-Holland Publ Co., Amsterdam, 1972.

Properties of Surface Magnetopolaron in CdF₂ Semiconductor

Xiao Jinglin, Eerdunchaolu, Zhang Peng

(Department of Physics, Inner Mongolia National Teachers' College, Tongliao, 028043)

(Laboratory of Excited State Physics, The Chinese Academy of Sciences, Changchun 130021)

Received 22 January 1998, revised manuscript received 15 December 1998

Abstract The influences of the electron interaction with both the weak-coupling bulk longitudinal optical phonons and the strong-coupling surface optical phonons on the properties of the surface magnetopolaron in CdF₂ semiconductor are studied. An effective Hamiltonian of the surface magnetopolaron in CdF₂ semiconductor is derived by using a linear-combination operator and perturbation method. Considering the interaction between phonons of different wave vectors in the recoil process, the influences on the properties of the surface magnetopolaron in CdF₂ semiconductor are discussed. Numerical calculations for CdF₂ semiconductor show that the vibration frequency λ and induced potential V_i^s of the surface magnetopolaron in CdF₂ semiconductor decrease with increasing the coordinate z and increase with increasing the magnetic field B . The induced potential V_i^b increases with the coordinate z , whereas it is independent of the magnetic field B . An effective potential V_{eff} increases with the coordinate z and the magnetic field B . The influence of the interaction between phonons Δ increases with increasing the coordinate z for $z < 3\text{nm}$, and it decreases with increasing the coordinate z for $z > 3\text{nm}$.

PACC: 7138, 7320