

晶格热振动对极性半导体膜中电子-表面声子强耦合极化子自陷能的影响*

额尔敦朝鲁¹ 李树深² 肖景林^{1,3}

(1 内蒙古民族大学物理系, 通辽 028043)

(2 中国科学院半导体研究所 半导体超晶格国家重点实验室, 北京 100083)

(3 中国科学院激发态物理开放研究实验室, 长春 130022)

摘要: 采用 Huybrechts 线性组合算符和变分法, 讨论了晶格热振动对极性半导体膜中电子-表面光学(SO) 声子强耦合和电子-体纵光学(LO) 声子弱耦合体系的影响, 得到了极化子自陷能随膜厚和温度变化的规律, 对 CdF₂ 半导体膜进行了数值计算, 结果表明, CdF₂ 极性半导体膜中表面光学声子和体纵光学声子对极化子自陷能的贡献分别在薄膜和宽膜情况下起主导作用. 并且发现 CdF₂ 半导体膜中的不同支声子与电子相互作用对极化子自陷能的贡献, 以及极化子的总自陷能都将随温度的升高而减小, 这表明晶格热振动将削弱电子-声子耦合.

关键词: 电子-声子强耦合; 极化子; 自陷能; 温度依赖性

PACC: 6320K; 7138

中图分类号: O471.4

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2001)06-0715-06

1 引言

多年来, 人们采用微扰法^[1, 2]、LLP 变分法^[3-5]、Feynman 路径积分法^[6-8]和 Green 函数法^[9, 10]等多种方法, 对极性膜和量子阱中电子的性质进行了大量的研究. 然而, 上述工作大多都局限于讨论电子-声子弱耦合情形, 并且为了简单起见, 大多都假设体系处于低温极限(0K).

最近, Qin 等^[11]采用 Green 函数方法, 在忽略表面声子影响的前提下, 研究了极性膜中电子-体纵光学(LO) 声子弱耦合极化子自陷能的温度依赖性. 文献[12]首次采用 Huybrechts 线性组合算符法, 讨论了零温下 CdF₂ 半导体膜中电子与表面光学(SO) 声子强耦合、与体纵光学(LO) 声子弱耦合极化子的性质. 本文在文献[12]的基础上, 进一步讨论了晶格热振动对极性半导体膜中电子-SO 声子强耦合和电

子-LO 声子弱耦合体系的影响, 得出了极化子自陷能随膜厚和温度变化的规律, 对 CdF₂ 半导体膜进行了数值计算, 结果表明, 极性半导体膜中极化子自陷能随温度升高而减小, 这表明, 晶格热振动削弱电子-声子耦合.

2 哈密顿量和变分计算

考虑一个被限制在厚度为 $2d$ 的极性半导体膜中的电子, 如图 1 所示. 在有效带质量近似下, 电子-声子相互作用体系的哈密顿量可以写作^[13]:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} \quad (1a)$$

其中

$$H_e = \frac{P^2}{2m_b} + V(z) \quad (1b)$$

$$V(z) = \begin{cases} 0 & |z| \leq d \\ \infty & |z| > d \end{cases} \quad (1c)$$

* 国家自然科学基金和中国科学院激发态物理开放研究实验室基金资助项目.

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.

李树深 男, 1963 年生, 副研究员, 目前主要从事固体理论的研究.

肖景林 男, 1939 年生, 教授, 目前主要从事晶体和半导体表面/界面物理的研究.

$$H_{\text{ph}} = H_{\text{LO}} + H_{\text{SO}} = \sum_{\vec{k}mt} \hbar \omega_{\text{LO}} a_{mt}^+(\vec{k}) a_{mt}(\vec{k}) + \sum_{\vec{q}t} \hbar \omega_t b_t^+(\vec{q}) b_t(\vec{q}) \quad (1d)$$

$$H_{e-\text{ph}} = H_{e-\text{LO}} + H_{e-\text{SO}} \quad (1e)$$

$$H_{e-\text{LO}} = \sum_{\vec{k}mt} [V_{mt}^*(k, z) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{p}} a_{mt}^+(\vec{k}) + H.C.] \quad (1f)$$

$$H_{e-\text{SO}} = \sum_{\vec{q}t} [V_t^*(q, z) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{p}} b_t^+(\vec{q}) + H.C.] \quad (1g)$$

其中 $V_{mt}^*(k, z)$ 、 $V_t^*(q, z)$ 、 ω_t 等各量的意义与文献 [12] 相同。

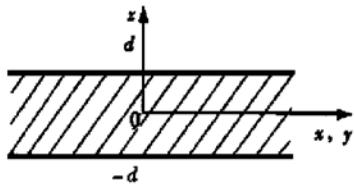


图 1 极性半导体膜的几何形状

FIG. 1 Geometry of the Semiconductor Slab

$$\begin{aligned} H_0 &= U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 = \frac{P_z^2}{2m_b} + V(z) + \frac{\hbar\lambda}{4} \sum_j (B_j^+ B_j^+ + B_j B_j) + \frac{\hbar\lambda}{2} (\sum_j B_j^+ B_j + 1) \\ &+ \frac{\hbar^2}{2m_b} \sum_{\vec{k}mt} k^2 (a_{mt}^+ + f_{mt}^*) (a_{mt} + f_{mt}) - \hbar \left[\frac{\hbar\lambda}{2m_b} \right]^{1/2} \sum_{\vec{k}mt} (a_{mt}^+ + f_{mt}^*) (a_{mt} + f_{mt}) \sum_j (B_j^+ + B_j) k_j \\ &+ \sum_{\vec{k}mt} \hbar \omega_{\text{LO}} (a_{mt}^+ + f_{mt}^*) (a_{mt} + f_{mt}) + \sum_{\vec{q}t} \hbar \omega_t (b_t^+ + f_t^*) (b_t + f_t) + \sum_{\vec{k}mt} [V_{mt}^* (a_{mt}^+ + f_{mt}^*) + H.C.] \\ &+ \sum_{\vec{q}t} [V_t^* (b_t^+ + f_t^*) e^{-\frac{\hbar q^2}{4m_b \lambda}} e^{-\left[\frac{\hbar}{2m_b \lambda}\right]^{1/2} \sum_j B_j^+ q_j} e^{\left[\frac{\hbar}{2m_b \lambda}\right]^{1/2} \sum_j B_j q_j} + H.C.] \end{aligned} \quad (4)$$

为了确定变分参数, 先求 H_0 的期待值。

$$F(\lambda, f_{mt}, f_t) = \langle \Psi_n | H_0 | \Psi_n \rangle \quad (5)$$

其中 $|\Psi_n\rangle = |\Phi_n(z)\rangle |n_j\rangle |n_k\rangle |n_q\rangle$ 是变分波函数, 它们满足

$$\begin{aligned} \left[\frac{P_z^2}{2m_b} + V(z) \right] |\Phi_n(z)\rangle &= \epsilon_n |\Phi_n(z)\rangle \\ \Phi_n(z) &= \begin{cases} 0, & |z| > d \\ \frac{1}{\sqrt{d}} \sin \left[\frac{n\pi}{2d} (z + d) \right], & |z| \leq d \end{cases} \quad (6) \\ \epsilon_n &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m_b d^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_j |n_j\rangle &= \sqrt{n_j} |n_j - 1\rangle \\ B_j^+ |n_j\rangle &= \sqrt{n_j + 1} |n_j + 1\rangle \\ a_{mt}^+ |n_k\rangle &= \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle \\ a_{mt}^+ |n_k\rangle &= \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle \quad (7) \\ b_t |n_q\rangle &= \sqrt{n_q} |n_q - 1\rangle, \end{aligned}$$

对电子的 $x-y$ 方向运动的动量和坐标引进 Huybrechts^[14] 线性组合算符:

$$\begin{aligned} P_j &= \left[\frac{m_b \hbar \lambda}{2} \right]^{1/2} (B_j + B_j^+) \\ \rho_j &= i \left[\frac{\hbar}{2m_b \lambda} \right]^{1/2} (B_j - B_j^+), \quad j = x, y \quad (2) \end{aligned}$$

其中 λ 为变分参量。

对哈密顿量作两次么正变换

$$U_1 = \exp \left[i \left(\sum_{\vec{k}mt} A_{1t} a_{mt}^+ \vec{k} + \sum_{\vec{q}t} A_{2t} b_t^+ \vec{q} \right) \cdot \vec{\rho} \right] \quad (3a)$$

$$U_2 = \exp \left[\sum_{\vec{k}mt} [f_{mt} a_{mt}^+(\vec{k}) + f_{mt}^* a_{mt}(\vec{k})] \right. \\ \left. + \sum_{\vec{q}t} [f_t b_t^+(\vec{q}) - f_t^* b_t(\vec{q})] \right] \quad (3b)$$

其中 $f_{mt}(k)[f_{mt}^*(k)]$ 和 $f_t(q)[f_t^*(q)]$ 都是变分参数。 $A_i(i=1, 2)$ 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 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合体系, $A_1=1, A_2=0$ 。于是,

$$b_t^+ |n_q\rangle = \sqrt{n_q + 1} |n_q + 1\rangle$$

式中 $|n_j\rangle$ 、 $|n_k\rangle$ 和 $|n_q\rangle$ 分别是电子态、体 LO 声子态和 SO 声子态在非零温时的波函数。

在有限温度时, 极化子的性质是电子-声子系统处在各种可能状态下的统计平均。如文献[15]所述, 声子频率虽随温度上升而下降, 但很不明显, 从极低温至室温, 仅改变 1%, 由此可近似取声子频率为恒值。因此, 可以近似地将电子数和声子数以其平均数代替, 并考虑到电子运动的对称性, $\bar{n} = \bar{n}_j(j=x, y)$, 则

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \left[\exp \left[\frac{\hbar\lambda}{k_B T} \right] + 1 \right]^{-1} \\ \bar{n}_k &= \left[\exp \left[\frac{\hbar\omega_{\text{LO}}}{k_B T} \right] - 1 \right]^{-1} \\ \bar{n}_q &= \left[\exp \left[\frac{\hbar\omega_t}{k_B T} \right] - 1 \right]^{-1} \quad (8) \end{aligned}$$

其中 k_B 是玻耳兹曼常数。求 F 关于各变分参量的极值, 得

$$\begin{aligned} f_{mt} &= - \frac{V_{mt}^*}{\hbar\omega_{lo} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b}(2n_k + 1)} \\ f_t &= - \frac{V_t^* B(n)}{\hbar\omega_{st} - \hbar\vec{u} \cdot \vec{q}} e^{-\frac{\hbar q^2}{2m_b\lambda}} \\ B(n) &= 1 - n \frac{\hbar q^2}{2m_b\lambda} + O\left(\frac{\hbar q^2}{2m_b\lambda}\right)^2 \end{aligned} \quad (9)$$

最后得到极化子基态能量的上限为:

$$E_0 = \epsilon_1 + \left[\frac{1}{n} + \frac{1}{2} \right] \hbar\lambda + \sum_{k, mt}^- n_k \hbar\omega_{lo} + \sum_{q, t}^- n_q \hbar\omega_{st} - E_{e-ph}^{tr} \quad (10)$$

其中 E_{e-ph}^{tr} 是极化子的自陷能, 由两部分组成:

$$E_{e-ph}^{tr} = E_{e-LO}^{tr} + E_{e-SO}^{tr} \quad (11a)$$

$$E_{e-LO}^{tr} = \frac{\alpha \hbar \omega_{lo}}{2d u_l} \left| \frac{\frac{3/2}{\pi^2(2n_k + 1)} \ln \left| \frac{4d^2 u_l^2}{\pi^2(2n_k + 1)} \right|}{1 - \frac{4d^2 u_l^2}{\pi^2(2n_k + 1)}} + \sum_{m=2,3,4,\dots}^{d/a} \frac{1}{1 - \frac{m^2 \pi^2(2n_k + 1)}{4d^2 u_l^2}} \ln \left| \frac{4d^2 u_l^2}{m^2 \pi^2(2n_k + 1)} \right| \right| \quad (11b)$$

$$\begin{aligned} E_{e-SO}^{tr}(t) &= \frac{\alpha \hbar \omega_{lo}}{du_l} \int_0^\infty dx e^{-2x} e^{-\frac{\hbar x^2}{2m_b d^2 \lambda}} \left[\frac{\pi^2 \sinh(2x)}{x(4x^2 + \pi^2)} + 2 \right] \\ &\times \left[1 - n \frac{\hbar x^2}{m_b d^2 \lambda} \right] \begin{cases} \frac{\tanh(x)}{[(\epsilon_\infty + 1) - (\epsilon_\infty - 1)e^{-2x}][(\epsilon_0 + 1) - (\epsilon_0 - 1)e^{-2x}]}, & t = + \\ \frac{\coth(x)}{[(\epsilon_\infty + 1) + (\epsilon_\infty - 1)e^{-2x}][(\epsilon_0 + 1) + (\epsilon_0 - 1)e^{-2x}]}, & t = - \end{cases} \end{aligned} \quad (11c)$$

从(11)式不难看出, 极性半导体膜中极化子的自陷能由两部分组成: 一部分是由于电子-体 LO 声子相互作用所引起的极化子效应, 另一部分则是电子-SO 声子相互作用所引起的极化子效应。后者又包含两部分, 分别是电子与半导体膜中两支表面声子相互作用的贡献。很明显, 极化子的自陷能及各组成部分均与极性半导体膜的厚度 d 和温度 T 有关。

3 数值分析与讨论

为了更清楚地说明极性半导体膜中各种光学极化模对电子性质的影响, 我们选择了一个具有较大电子-SO 声子耦合常数和较小电子-LO 声子耦合常数的材料——CdF₂ 极性半导体膜, 进行数值计算, 所使用材料参数为^[16, 17] $\epsilon_0 = 7.8$, $\epsilon_\infty = 2.4$, $\hbar\omega_{lo} = 50.4 \text{ eV}$, $\alpha = 3.2$, $\alpha_s = 4.23$, $m_b/m_e = 0.45$, $a = 0.54 \text{ nm}$ 。数值结果示于图 2—4。数值结果表明, CdF₂ 半导体膜中电子-声子相互作用诱发的极化子自陷能很强地依赖于温度 T 和膜厚 d 。

图 2(a) 和(b) 分别描绘了 CdF₂ 半导体膜中电子-SO 声子相互作用所产生的极化子自陷能 E_{e-SO}^{tr} [$\approx E_{e-SO}^{tr}(-)$]^[12] 在不同温度 T 时随膜厚 d 的变化和在不同膜厚 d 时随温度 T 的变化关系。由图 2(a)

可以看出, E_{e-SO}^{tr} 在不同温度 T 下, 随膜厚 d 的增加而迅速减小, 当 $d > 10 \text{ nm}$ 时, E_{e-SO}^{tr} 变得很小, 几乎可以忽略不计。由图 2(a) 和(b) 可以看出, E_{e-SO}^{tr} 随温度 T 的升高而减小, 当 $T < 80 \text{ K}$ 时, 变化不明显, 当 $T > 80 \text{ K}$ 时, 开始显著变化。

图 3(a) 和(b) 分别表示了 CdF₂ 半导体膜中电子-LO 声子相互作用所引起的极化子的自陷能 E_{e-LO}^{tr} 在不同温度 T 时随膜厚 d 的变化和在不同膜厚 d 时随温度 T 的变化关系。由图 3(a) 可以看出, 在不同温度下, E_{e-LO}^{tr} 随膜厚 d 的增加而逐渐增大, 最后, 当膜厚足够大时, 趋于一定值。图 3(a) 和 3(b) 表明, 在不同的膜厚 d 下, E_{e-LO}^{tr} 随温度 T 的升高而减小, 当 $T < 80 \text{ K}$ 时, 变化不明显, 而当 $T > 80 \text{ K}$ 时, 开始显著变化。

图 4 描绘了 CdF₂ 半导体膜中极化子总自陷能 E_{e-ph}^{tr} 在不同温度 T 时随膜厚 d 的变化曲线。由图可以看出, 总自陷能 E_{e-ph}^{tr} 随温度 T 的升高而减小, 当 $T > 80 \text{ K}$ 时, 这种变化更加明显。 E_{e-ph}^{tr} 随膜厚 d 的增加而先减小后增加, 当膜厚 $d < 5 \text{ nm}$ 时, E_{e-ph}^{tr} 随膜厚 d 的增加而迅速减小, 当膜厚 $5 \text{ nm} < d < 10 \text{ nm}$ 时, E_{e-ph}^{tr} 随膜厚 d 的增加而缓慢减小并开始增加, 当膜厚 $d > 10 \text{ nm}$ 时, E_{e-ph}^{tr} 随膜厚 d 的增加而增加, 最后, 趋于一定值。

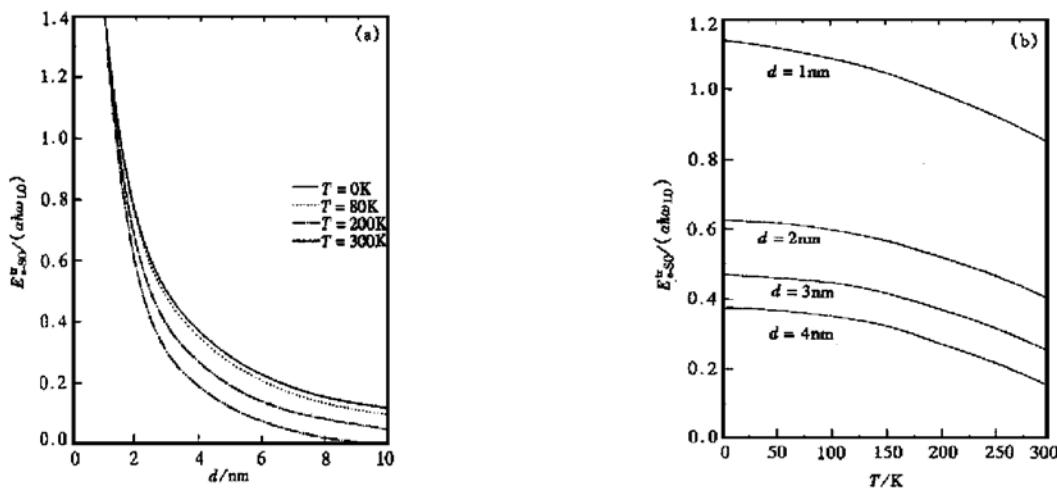


图 2 (a) CdF₂ 半导体膜中极化子的自陷能 E_{e-so}^{tr} 在不同的温度 T 下随膜 d 的变化; (b) CdF₂ 半导体膜中极化子的自陷能 E_{e-so}^{tr} 在不同膜厚 d 随温度 T 的变化

FIG. 2 (a) Relation Between Self-Trapping Energy E_{e-so}^{tr} in Slab of Semiconductor CdF₂ with Slab Thickness d at Different Temperature T ; (b) Relation Between Self-Trapping Energy E_{e-so}^{tr} in Slab of Semiconductor CdF₂ with Temperature T at Different Slab Thickness d

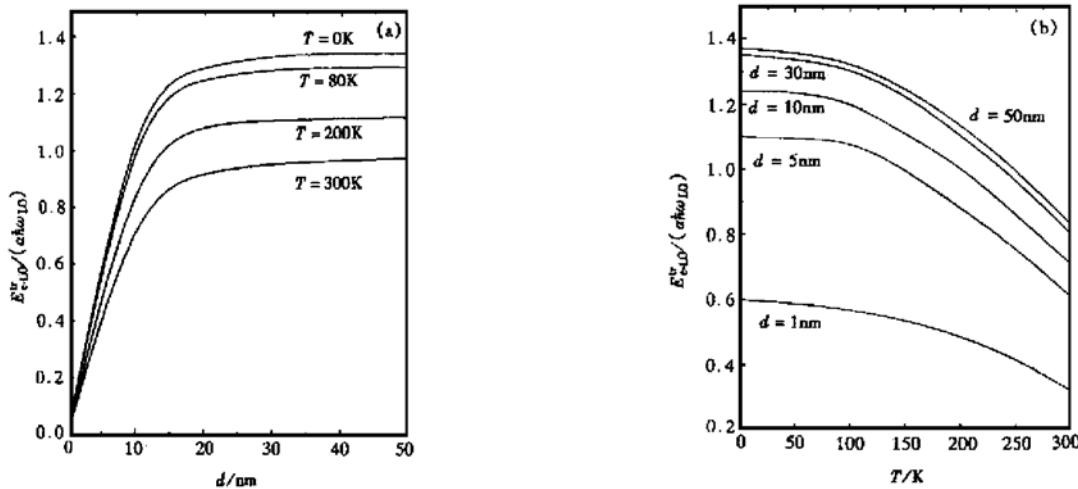


图 3 (a) CdF₂ 半导体膜中极化子的自陷能 E_{e-Lo}^{tr} 在不同温度 T 下随膜厚 d 的变化; (b) CdF₂ 半导体膜中极化子的自陷能 E_{e-Lo}^{tr} 在不同膜厚 d 随温度 T 的变化

FIG. 3 (a) Relation Between Self-Trapping Energy E_{e-Lo}^{tr} in Slab of Semiconductor CdF₂ with Slab Thickness d at Different Temperature T ; (b) Relation Between Self-Trapping Energy E_{e-Lo}^{tr} in Slab of Semiconductor CdF₂ with Temperature T at Different Slab Thickness d

4 结论

综上所述, 我们的研究结果表明, CdF₂ 极性半导体膜中表面光学声子和体纵光学声子对极化子自陷能的贡献分别在薄膜和厚膜情况下起主导作用,

这说明在 CdF₂ 极性半导体膜中表面光学声子和体纵光学声子的极化分别在薄膜和厚膜情况下占主导地位, 特别是对于其中电子与 SO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合的 CdF₂ 极性半导体薄膜而言, 表面声子的作用尤为重要。从数值结果也不难看出, CdF₂ 极性半导体膜中的不同支声子与电子相互作

用对极化子自陷能的贡献, 以及极化子的总自陷能都将随温度的升高而减小, 其程度随着温度的升高而加强, 这表明, 晶格热振动将削弱电子-声子耦合.

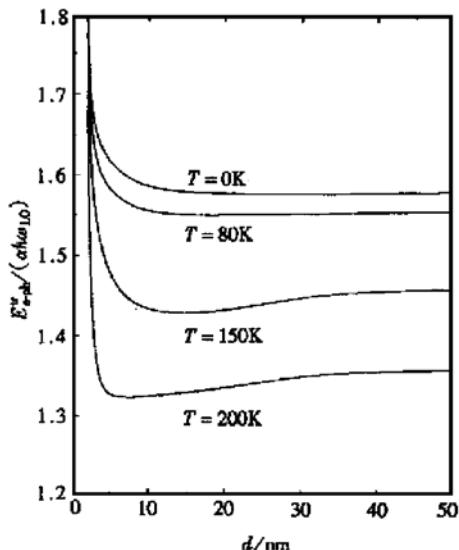


图 4 CdF₂ 半导体膜中极化子的总自陷能 E_{e-ph}^{tr} 在不同温度 T 下随膜厚 d 的变化

FIG. 4 Variation of Total Self-Trapping Energy E_{e-ph}^{tr} of Polaron in Semiconductor CdF₂ Slab with Slab Thickness d at Different Temperature T

参考文献

- [1] H. Fröhlich, Pelzer and S. Zienau, Phil. Mag., 1950, **41**: 211.
- [2] O. V. Selyugin and M. A. Smolyrev, Phys. Status Solidi B, 1989, **155**: 155.
- [3] T. D. Lee, F. E. Low and D. Pines, Phys. Rev., 1953, **90**: 279.
- [4] S. W. Gu, Y. C. Li and L. F. Zheng, Phys. Rev., 1989, **B39**: 1346.
- [5] R. S. Zheng, S. L. Ban and X. X. Liang, Phys. Rev., 1994, **B49**: 1796.
- [6] C. Alexandrou, W. Fleischer and R. Rosenfelder, Phys. Rev. Lett., 1990, **65**: 2615.
- [7] C. Alexandrou and R. Rosenfelder, Phys. Rep., 1992, **215**: 1.
- [8] Y. Lu and R. Rosenfelder, Phys. Rev., 1992, **B46**: 5211.
- [9] A. S. Alexandrou, Phys. Rev., 1992, **B46**: 2838.
- [10] S. Ciuchi, F. De Pasquale and D. Feinberg, Physica, 1994, **C235—240**: 2389.
- [11] R. H. Qin and S. W. Gu, Solid State Communication, 1997, **104**: 425.
- [12] Eerdunchaolu, XIAO Jing-Lin and LI Shu-shen., Chinese Journal of Semiconductors, 2000, **21**(3): 225[额尔敦朝鲁, 肖景林, 李树深, 半导体学报, 2000, **21**(3): 225].
- [13] J. Licari and R. Evrard, Phys. Rev., 1977, **B15**: 2254.
- [14] W. J. Huybrechts, J. Phys., 1976, **C9**: L211.
- [15] M. A. Brummell, R. J. Nicholas, M. A. Hopkins et al., Phys. Rev. Lett., 1987, **58**: 77.
- [16] E. Kartheuser, Polaron in Ionic Crystals and Polar Semiconductors, North-Holland, New York, 1972.
- [17] G. Busch and H. Schade, Lecture on Solid Physics, Tr by Ferdinand Cap. Oxford, Pergamon, 1976.

Effects of Lattice Vibration on Self-Trapping Energy of Polaron of Electron-Surface Phonons Strong-Coupling in Polar Semiconductor Slab^{*}

Eerdunchaolu¹, LI Shu-shen² and XIAO Jing-lin^{1,3}

(1 Department of Physics, Inner Mongolia National University, Tongliao 028043, China)

(2 National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors,

The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)

(3 Laboratory of Excited State Processes, The Chinese Academy of Sciences, Changchun 120021, China)

Abstract: The effects of lattice vibration on the properties of the polaron in the polar semiconductor slab has been discussed by using the Huybrechts' linear-combination operator and variational methods, which is the electron interaction with both the weak-coupling bulk longitudinal optical phonons and the strong-coupling surface optical phonons. The relationship of the self-trapping energy of the polaron versus the thickness of the slab and temperature has been obtained. The numerical results of CdF₂ semiconductor slab show that the contribution of the surface and bulk phonons on the self-trapping energy of the polarons is dominant at thinner and thicker slabs, respectively. It is also shown that the contribution of the interaction between the electron and various phonon branches on polaron's self-trapping energy and the polaron's total self-trapping energy in polar semiconductor slab will decrease with the temperature increasing. It also shows that the electron-phonons coupling is weaken by the lattice vibration.

Key words: electron-surface phonons strong-coupling; polaron; self-trapping energy; temperature dependence

PACC: 6320K; 7138

Article ID: 0253-4177(2001)06-0715-06

* Project Supported by National Natural Science Foundation of China and by Science Foundation of Key Laboratory for Excited Physics of The Chinese Academy of Sciences.

Eerdunchaolu male, was born in 1959, associate professor. Now he is engaged in research on surface exciton and polaron in the crystal and the semiconductor.

LI Shu-shen male, was born in 1963, associate professor. Now he is engaged in research on solid theory.

XIAO Jing-lin male, was born in 1939, professor. Now he is engaged in research on surface and interface physics in the crystal and the semiconductor.