

CdF₂ 半导体膜中电子-表面声子强耦合 对极化子性质的影响*

额尔敦朝鲁¹ 肖景林¹ 李树深²

(1 内蒙古民族师范学院物理系 内蒙古通辽市 028043)

(2 半导体超晶格国家重点实验室 北京 100083)

摘要 采用改进的 Huybrechts 线性组合算符和变分方法,研究了半导体膜内电子与表面光学声子强耦合、与体纵光学声子弱耦合对极化子性质的影响,得到了极化子的有效质量和自陷能随膜厚的变化规律.对 CdF₂ 半导体,计算了不同支声子与电子的相互作用对极化子有效质量和自陷能的贡献.

关键词: 电子-声子耦合,极化子, CdF₂

PACC: 6320K, 7138

文章编号: 0253-4177(2000)03-0225-07

Influence of Electron-Surface Phonon Strong-Coupling on Properties of Polaron in CdF₂ Semiconductor Slab*

Eerdunchaolu¹, XIAO Jing-lin¹ and LI Shu-shen²

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

(2 *National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors,
The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

Received 16 November 1998, revised manuscript received 9 March 1999

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 polaron in a semiconductor slab are studied by using improved Huybrechts' linear combination operator and variational

* 国家自然科学基金(批准号: 69736010)和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[Project Supported by National Natural Science Foundation of China (Under Grant No. 69736010 and by Science Foundation of Key Laboratory for Excited Physics of The Chinese Academy of Sciences)].

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.

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.

李树深 男, 1963 年出生, 副研究员, 目前主要从事固体理论研究.

1998-11-16 收到, 1999-03-09 定稿

method. The law of the change of the effective mass and the self-trapping-energy of the polaron changing with the thickness of the slab is derived. For CdF₂ semiconductor, the contributions of different branches phonon-electron interaction on the effective mass and self-trapping-energy of the polaron are calculated.

Key Words: Electron-Phonon Coupling, Polaron, CdF₂

PACC: 6320K, 76138

Article ID: 0253-4177(2000)03-0225-07

1 引言

随着分子束外延等新技术的发展和半导体制造业的兴起,极性膜、量子阱和超晶格等微结构的研究引起了人们的极大兴趣和关注.

在极性膜的研究工作中, Licari 和 Evrard^[1] 导出了包括电子与体纵光学(LO)声子, 电子与表面光学(SO)声子相互作用的电子-声子相互作用体系的哈密顿量. 随后, 许多学者^[2-8] 对极性膜中电子态的性质进行了大量的研究. 人们从仅考虑电子与 LO 声子相互作用^[2-5], 发展到不仅考虑电子与 LO 声子相互作用, 还要考虑电子与 SO 声子的相互作用^[6-8], 并逐步认识到电子-声子相互作用与极性膜的尺度密切相关(量子限制效应), 也认识到, 电子与表面光学声子的相互作用对整个体系的性质有着重要影响(极化子效应), 特别是对薄膜的情况尤为重要. 但所有以上这些对极性膜的研究仅局限于电子-声子弱、中耦合的情形. 最近, Huang 等^[9] 采用推广的 Peker 变分法, 研究了极性膜内电子与 SO 声子和 LO 声子均为强耦合时极化子的性质.

事实上, 有不少的晶体和半导体, 其中电子与 LO 声子的耦合弱、而与 SO 声子的耦合强^[10-12]. 然而, 迄今为止, 人们对这类晶体和半导体膜还没有研究过. 本文采用改进的 Huybrechts 线性组合算符和变分方法, 研究电子与 LO 声子耦合弱、与 SO 声子耦合强的半导体膜中电子-声子相互作用系统的性质, 得出了极化子的有效质量和自陷能随膜厚的变化规律. 对 CdF₂ 半导体膜, 计算了不同支声子与电子相互作用对极化子的有效质量和自陷能的贡献, 结果表明, 对于薄膜情形, 电子与表面声子相互作用的贡献, 不仅对极化子的自陷能, 而且对有效质量同样都是最主要的.

2 哈密顿量和变分计算

考虑一个被限制在厚度为 $2d$ 的半导体膜中的电子, 如图 1. 在有效带质量近似下, 电子-声子相互作用系统的哈密顿量可以写作^[1]

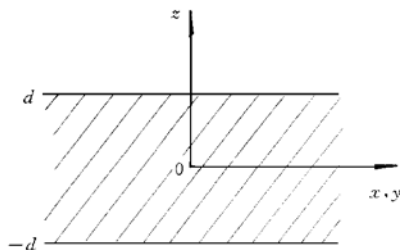


图 1 半导体膜的几何形状

FIG. 1 Geometry of Semiconductor Slab

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

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

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

$$H_{ph} = H_{LO} + H_{SO} = \sum_{\vec{k}m\alpha} \hbar \omega_{\alpha} a_{m\alpha}^{\dagger}(\vec{k}) a_{m\alpha}(\vec{k}) + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger}(\vec{q}) b_{\alpha}(\vec{q}) \quad (1d)$$

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

$$H_{e-LO} = \sum_{\vec{k}m\alpha} [V_{m\alpha}^{\dagger}(k, z) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} a_{m\alpha}^{\dagger}(\vec{k}) + H C]$$

$$H_{e-s_0} = \sum_{\vec{q}} [V_i^*(q, z) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} b_i^*(\vec{q}) + H_C]$$

其中

$$V_{m_i}^*(k, z) = \left[k^2 + \left[\frac{m\pi}{2d} \right]^2 \right]^{1/2} \times \begin{cases} \cos \left[\frac{m\pi}{2d} z \right], & t = +; m = 1, 3, 5, \dots \\ \sin \left[\frac{m\pi}{2d} z \right], & t = -; m = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (1f)$$

$$V_i^*(q, z) = C^* \left[\frac{\sinh(2qd)}{q} \right]^{1/2} e^{-qd} \times \begin{cases} \frac{\cosh(qz)/\cosh(qd)}{(\epsilon_\infty + 1) - (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}} \left[\frac{(\epsilon_\infty + 1) - (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_0 + 1) - (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/4}, & t = + \\ \frac{\sinh(qz)/\sinh(qd)}{(\epsilon_\infty + 1) + (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}} \left[\frac{(\epsilon_\infty + 1) + (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_0 + 1) + (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/4}, & t = - \end{cases} \quad (1g)$$

$$B^* = i \left[\frac{4\pi e^2}{V} \hbar \omega_{\text{LO}} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right] \right]^{1/2}, \quad C^* = i \left[\frac{2\pi e^2}{S} \hbar \omega_{\text{RO}} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right] \right]^{1/2} \quad (1h)$$

$$\omega_{\text{RO}} = \sqrt{\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}} \omega_{\text{LO}}, \quad \omega_{\pm} = \sqrt{\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}} \omega_{\text{LO}} \left[\frac{(\epsilon_0 + 1) \mp (\epsilon_0 - 1)e^{-2qd}}{(\epsilon_\infty + 1) \mp (\epsilon_\infty - 1)e^{-2qd}} \right]^{1/2} \quad (1i)$$

式中 m_b 是电子的有效带质量; $\vec{k}_{\text{LO}} = (\vec{k}, k_z)$ 为 LO 声子的波矢, 其中 $\vec{k} = k_x \vec{i} + k_y \vec{j}, k_z = \frac{m\pi}{2d}, m = 1, 2, \dots, \frac{D}{2}, D = \frac{2d}{a}, a$ 为晶格常数; $\vec{q} = q_x \vec{i} + q_y \vec{j}$ 为 SO 声子的波矢; $\vec{r} = (\vec{r}, z), \vec{r} = x \vec{i} + y \vec{j}$ 为电子位矢; t 为 $z = 0$ 平面镜像对称的字称, 取 “+” 或 “-”, t 取 “+” 时, m 取奇数, t 取 “-” 时, m 取偶数; S 和 V 分别表示半导体膜的表面积和体积.

为了求极化子能量和有效质量, 按变分原理作一函数

$$\hat{J} = H - \vec{u} \cdot \vec{P}_{\parallel T} \quad (2)$$

$$\vec{P}_{\parallel T} = \vec{P}_{\parallel} + \sum_{\vec{k}m} \hbar \vec{k} a_{m_i}^*(\vec{k}) a_{m_i}(\vec{k}) + \sum_{\vec{q}} \hbar \vec{q} b_i^*(\vec{q}) b_i(\vec{q}) \quad (3)$$

是系统的总动量算符, \vec{P}_{\parallel} 是电子的动量算符, \vec{u} 是 Lagrange 乘数因子.

对电子的 $x-y$ 方向运动的动量和坐标引进改进的 Huybrechts 线性组合算符^[13], 并对 (2) 式作两次么正变换

$$U_1 = \exp \left[i \left(\sum_{\vec{k}m} A_1 a_{m_i}^*(\vec{k}) a_{m_i}(\vec{k}) \vec{k} + \sum_{\vec{q}} A_2 b_i^*(\vec{q}) b_i(\vec{q}) \vec{q} \right) \cdot \vec{p} \right] \quad (4a)$$

$$U_2 = \exp \left[\sum_{\vec{k}m} [f_{m_i}(\vec{k}) a_{m_i}^*(\vec{k}) - f_{m_i}^*(\vec{k}) a_{m_i}(\vec{k})] + \sum_{\vec{q}} [f_i(\vec{q}) b_i^*(\vec{q}) - f_i^*(\vec{q}) b_i(\vec{q})] \right] \quad (4b)$$

其中 $f_{m_i}(\vec{k}) [f_{m_i}^*(\vec{k})]$ 和 $f_i(\vec{q}) [f_i^*(\vec{q})]$ 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, 对我们讨论的电子与 LO 声子耦合弱、与 SO 声子耦合强的情形, $A_1 = 1, A_2 = 0$.

为了确定变分参量, 先求 J 的期待值 $\langle J \rangle$

$$\langle J \rangle = \langle \psi_0 | U_2^{-1} U_1^{-1} J U_1 U_2 | \psi_0 \rangle \quad (5)$$

为简化起见, 我们假定系统处于低温极限 ($T = 0\text{K}$), 从而除了极化激发外, 系统处于真空态, 电子亦处于低能态. 选基态波函数为 $|\psi_0\rangle = |\mathcal{Q}(z)\rangle |0\rangle$, 其中 $|\mathcal{Q}(z)\rangle$ 满足

$$\left[\frac{P_z^2}{2m_b} + V(z) \right] |\mathcal{Q}(z)\rangle = \epsilon_n |\mathcal{Q}(z)\rangle \quad (6a)$$

$$\mathcal{Q}(z) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d}} \sin \left[\frac{n\pi}{2d} (z + d) \right], & |z| \leq d \\ 0, & |z| \geq d \end{cases}, \quad \epsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m_b d^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6b)$$

$|0\rangle$ 是零声子态, 满足 $a_m|0\rangle = b_i|0\rangle = B_j|0\rangle = 0$.

求 $\langle J \rangle$ 关于变分参量的极值, 可确定各变分参量, 并将它们代入 $\langle J \rangle$ 中可得

$$\begin{aligned} \langle J \rangle = & \epsilon_1 + \frac{\hbar\lambda}{2} - \frac{\alpha\hbar\omega_{\text{LO}}}{2d} \left[\frac{\hbar}{2m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{1/2} M(d) - \frac{\alpha\hbar\omega_{\text{LO}}}{d} \left[\frac{\hbar}{2m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{1/2} \\ & [N_+(d, \lambda) + N_-(d, \lambda)] - \frac{1}{2} m_b u^2 \left[\frac{1}{1 - \frac{2\sqrt{2}\alpha}{d} \left[\frac{\hbar}{m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{1/2} \left[\frac{2}{3} I_1 + \sum_m I_m \right]} \right. \\ & \left. + \frac{2\sqrt{2}\epsilon_0\alpha}{d^3\epsilon_\infty} \left[\frac{\hbar}{m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{3/2} K(d, \lambda) \right] \end{aligned} \quad (7a)$$

其中

$$I_m(d) = \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{[x^2 + (m\pi/2du)^2]^2 (1+x^2)^3}, \quad u = \left[\frac{2m_b\omega_{\text{LO}}}{\hbar} \right]^{1/2} \quad (7b)$$

$$M(d) = \frac{3/2}{1 - \frac{\pi^2\hbar}{4d^2m_b\omega_{\text{LO}}}} \ln \left[\frac{8d^2m_b\omega_{\text{LO}}}{\pi^2\hbar} \right] + \sum_{m=2,3,4,\dots} \frac{1}{1 - \frac{m^2\pi^2\hbar}{8d^2m_b\omega_{\text{LO}}}} \ln \left[\frac{8d^2m_b\omega_{\text{LO}}}{m^2\pi^2\hbar} \right] \quad (7c)$$

$$\begin{aligned} N_+(d, \lambda) = & \int_0^\infty dx \exp(-2x) \exp \left[-\frac{\hbar x^2}{2m_b d^2 \lambda} \right] \left[\frac{\pi^2 \sinh(2x)}{x(4x^2 + \pi^2)} + 2 \right] \\ & \times \frac{\tanh(x)}{[(\epsilon_+ + 1) - (\epsilon_- - 1)e^{-2x}][(\epsilon_+ + 1) - (\epsilon_- - 1)e^{-2x}]} \end{aligned} \quad (7d)$$

$$\begin{aligned} N_-(d, \lambda) = & \int_0^\infty dx \exp(-2x) \exp \left[-\frac{\hbar x^2}{2m_b d^2 \lambda} \right] \left[\frac{\pi^2 \sinh(2x)}{x(4x^2 + \pi^2)} + 2 \right] \\ & \times \frac{\text{ctanh}(x)}{[(\epsilon_+ + 1) + (\epsilon_- - 1)e^{-2x}][(\epsilon_+ + 1) + (\epsilon_- - 1)e^{-2x}]} \end{aligned} \quad (7e)$$

$$\begin{aligned} K(d, \lambda) = & \int_0^\infty dx x^2 \exp(-2x) \exp \left[-\frac{\hbar x^2}{2m_b d^2 \lambda} \right] \left[\frac{\pi^2 \sinh(2x)}{4x(4x^2 + \pi^2)} + \frac{1}{2} \right] \\ & \times \left[\frac{\tanh(x)}{[(\epsilon_+ + 1) - (\epsilon_- - 1)e^{-2x}]^2} + \frac{\text{ctanh}(x)}{[(\epsilon_+ + 1) + (\epsilon_- - 1)e^{-2x}]^2} \right] \end{aligned} \quad (7f)$$

在推导中忽略了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所引起的附加贡献. 不难看出极化子动量的平均值为

$$P_{\parallel} = m_b \left[\frac{1}{1 - \frac{2\sqrt{2}\alpha}{d} \left[\frac{\hbar}{m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{1/2} \left[\frac{2}{3} I_1 + \sum_m I_m \right]} + \frac{2\sqrt{2}\epsilon_0\alpha}{d^3\epsilon_\infty} \left[\frac{\hbar}{m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{3/2} K(d, \lambda) \right] u \quad (8)$$

可见, Lagrange 乘数因子 u 正是极化子在 x - y 平面内的平均速度, 而极化子的有效质量为

$$m^* = m_b \left[\frac{1}{1 - \frac{2\sqrt{2}\alpha}{d} \left[\frac{\hbar}{m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{1/2} \left[\frac{2}{3} I_1 + \sum_m I_m \right]} + \frac{2\sqrt{2}\epsilon_0\alpha}{d^3\epsilon_\infty} \left[\frac{\hbar}{m_b\omega_{\text{LO}}} \right]^{3/2} K(d, \lambda) \right] \quad (9)$$

其中 第一项是电子与 LO 声子的相互作用对有效质量的贡献; 第二项是电子与 SO 声子的相互作用对有效质量的贡献.

极化子基态能量的上限为

$$E_0 = \langle \psi_0 | U_2^{-1} U_1^{-1} H U_1 U_2 | \psi_0 \rangle = \epsilon_1 + \frac{\hbar\lambda}{2} - E_{e-\text{ph}}^{\text{tr}} \quad (10)$$

其中 $E_{e-\text{ph}}^{\text{tr}}$ 是极化子的自陷能, 它由两部分组成

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

其中

$$E_{e-LO}^{tr} = \frac{\alpha \hbar \omega_{LO}}{2d} \left[\frac{\hbar}{2m_b \omega_{LO}} \right]^{1/2} M(d), \quad E_{e-so}^{tr} = E_{e-so(+)}^{tr} + E_{e-so(-)}^{tr} \quad (11b)$$

$$E_{e-so(+)}^{tr} = \frac{\alpha \hbar \omega_{LO}}{d} \left[\frac{\hbar}{2m_b \omega_{LO}} \right]^{1/2} N_+(d, \lambda), \quad E_{e-so(-)}^{tr} = \frac{\alpha \hbar \omega_{LO}}{d} \left[\frac{\hbar}{2m_b \omega_{LO}} \right]^{1/2} N_-(d, \lambda) \quad (11c)$$

其中 $\alpha = \frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}} \left[\frac{2m_b\omega_{LO}}{\hbar} \right]^{1/2} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right]$ 为电子和 LO 声子的耦合常数。J 对 λ 求极小值, 获得 λ_0 , 再将 λ_0 代入(9)式和(11)式中, 最后得到极化子的有效质量和自陷能。

从(11a)~(11c)式不难看出, 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。由(9)式可以看出, 极化子的有效质量也由两项组成: 第一项是电子-体 LO 声子相互作用对极化子有效质量的贡献, 第二项是电子-SO 声子相互作用对极化子有效质量的贡献。

3 数值分析及讨论

为了更清楚地说明半导体膜中各种光学极化模对电子性质的影响(极化子效应), 我们具体以 CdF₂ 半导体膜为例, 进行数值计算, 材料参数^[14,15]为, $\epsilon_0 = 7.8$, $\epsilon_\infty = 2.4$, $\hbar\omega_{LO} = 50.4\text{meV}$, $\alpha = 3.2$, $\alpha = 4.23$, $m_b/m_e = 0.45$, $a = 0.54\text{nm}$, 数值结果分别示于图 2~ 图 4 中。

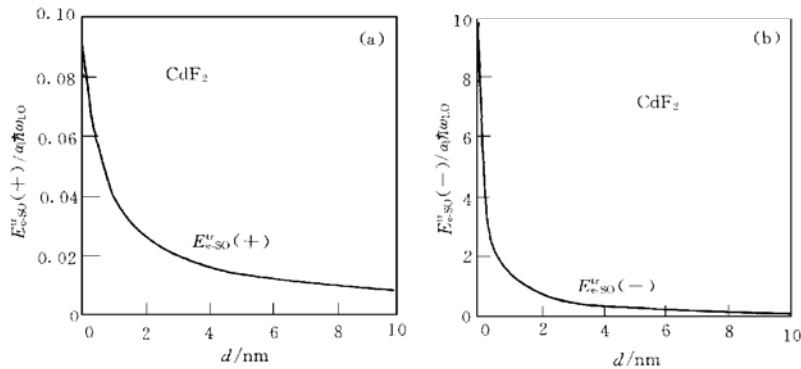


图 2 CdF₂ 半导体膜中由于电子-表面光学声子相互作用所产生的极化子自陷能

$E_{e-so(+)}^{tr}$ 和 $E_{e-so(-)}^{tr}$ 随膜厚 d 的变化曲线

FIG. 2 Change of Polaron Self-Trapping Energy $E_{e-so(+)}^{tr}$ and $E_{e-so(-)}^{tr}$ with Film Thickness d in Semiconductor CdF₂ Slab

图 2(a)和图 2(b)中, 分别描绘了 CdF₂ 半导体膜中由于电子-表面光学声子相互作用所产生的极化子自陷能 $E_{e-so(+)}^{tr}$ 和 $E_{e-so(-)}^{tr}$ 随 d 的变化曲线。由图中不难看出, $E_{e-so(+)}^{tr}$ 和 $E_{e-so(-)}^{tr}$ 随 d 的增加而减小, 且两支表面光学声子 (ω_+ 和 ω_-) 与电子的耦合程度是大不相同的。对称 ($t = +$) 的表面光学声子-电子相互作用很弱, 所产生的自陷能 $E_{e-so(+)}^{tr}$ 很小, 而反对称 ($t = -$) 的表面光学声子-电子相互作用则很强, 所产生的自陷能 $E_{e-so(-)}^{tr}$ 比 $E_{e-so(+)}^{tr}$ 大两个数量级。因此, 对称的表面光学声子-电子相互作用所产生的自陷能 $E_{e-so(+)}^{tr}$ 是可以忽略的。

图 3 表示了 CdF₂ 半导体膜中电子-体 LO 声子相互作用所产生的自陷能 E_{e-LO}^{tr} 、电子-SO 声子相互作用所产生的自陷能 E_{e-so}^{tr} 和总自陷能 E_{e-ph}^{tr} 随膜厚 d 的变化曲线。由图可以看出, E_{e-so}^{tr} 随 d 的增加而减小,

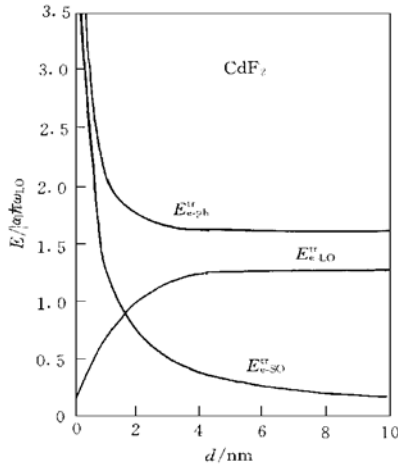


图3 CdF₂ 半导体膜中极化子的自陷能 E_{LO}^{tr} 、 E_{SO}^{tr} 、 E_{ph}^{tr} 随膜厚 d 的变化
FIG. 3 The Change of the Self-Trapping Energy of the Polaron E_{LO}^{tr} , E_{SO}^{tr} , and E_{ph}^{tr} with Film Thickness d in Semiconductor CdF₂ Slab

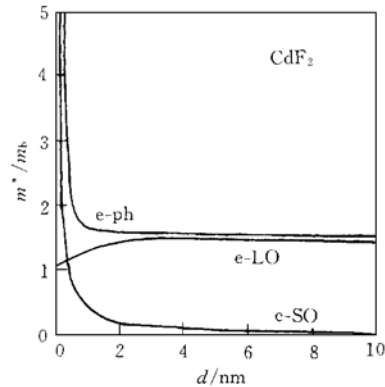


图4 CdF₂ 半导体膜中极化子的有效质量随膜厚 d 的变化曲线
FIG. 4 The Change of Effective Mass m^* of the Polaron in Semiconductor CdF₂ Slab with the Film Thickness d

而 E_{LO}^{tr} 随 d 的增加而增大. 当半导体膜较薄时, 电子-SO 声子的相互作用是主要的, 随着膜厚 d 的增加, E_{SO}^{tr} 迅速下降, 当 $d > 10\text{nm}$ 以后, 几乎趋于零. 电子-LO 声子相互作用产生的自陷能 E_{LO}^{tr} , 随着膜厚 d 的增加而逐渐增大, 最后当膜厚足够大时, 趋于一定值. 当 $d < 20\text{nm}$ 时, 总自陷能 E_{ph}^{tr} 随膜厚 d 的增加而迅速减小. 这是因为, 膜的厚度在此范围内时, 电子-SO 声子相互作用是主要的. 当 $2\text{nm} < d < 3\text{nm}$ 时, E_{ph}^{tr} 随 d 的增加略有减小, 膜的厚度在此范围内时, 电子-SO 声子和电子-LO 声子相互作用对极化子自陷能的贡献差别不大. 当膜的厚度 $d > 3\text{nm}$ 时, 总的自陷能 E_{ph}^{tr} 趋于一定值, 这是因为电子-LO 声子相互作用对自陷能的贡献比电子-SO 声子相互作用的贡献逐渐增大, 当 $d > 8\text{nm}$ 时, 电子-LO 声子相互作用对自陷能的贡献是主要的, 并与三维(3D)结果定性一致. 这一结果的物理图象是显然的, 当半导体膜较薄时, 表面声子与电子的耦合较强, 反之, 体 LO 声子与电子的耦合较强.

图4表示了 CdF₂ 半导体膜中极化子的有效质量 m^* 随膜厚 d 的变化曲线, 图中 e-SO 曲线和 e-LO 曲线分别表示电子-SO 声子相互作用和电子-LO 声子相互作用对极化子有效质量的贡献. 由图可以看出, 极化子的有效质量随膜厚的增加而减小, 当半导体膜的厚度较薄 ($d < 2\text{nm}$) 时, 有效质量随膜厚的增加而迅速减小, 这是由于膜的厚度在此范围内时, 电子-SO 声子相互作用对有效质量的贡献是主要的, 随着膜厚的增加, 电子-LO 声子相互作用对有效质量的贡献变成了主要的. 我们发现, 所有这些电子-SO 声子相互作用和电子-LO 声子相互作用对极化子有效质量的影响的特性, 完全类似于它们对极化子自陷能的影响.

总之, 我们的研究表明, CdF₂ 半导体膜中电子与不同支声子耦合的强烈程度是不同的. 在膜厚较薄时, 电子与表面声子的耦合较强, 并且与宇称为负的表面声子的耦合较与宇称为正的表面声子的耦合强得多, 后者在我们所研究的系统中是可以忽略的. 在半导体膜较厚的情况下, 电子与体纵光学声子的耦合是主要的, 而表面声子的作用就比较小了. 因此, 在半导体膜结构中, 考虑表面声子的作用是很有必要的, 特别是对那些电子与表面光学声子耦合强、与体光学声子耦合弱的晶体和半导体膜是尤为重要.

参 考 文 献

- [1] J. J. Licari, R. Evrand, *Phys. Rev.* , 1977, **B15**: 2254.
- [2] J. J. Licari, *Solid State Commun.* , 1979, **29**: 625.
- [3] A. V. Sherman, *Solid State Commun.* , 1981, **39**: 273.
- [4] M. H. Hawton, V. V. Paranjape, *J. Phys. Soc. Jpn.* , 1983, **49**: 3563.
- [5] S. Das Sarma, *Phys. Rev.* , 1983, **B27**: 2590.
- [6] X. X. Liang, S. W. Gu, D. L. Lin, *Phys. Rev.* , 1986, **B34**: 2807.
- [7] D. Ninno, G. Iadonisi, *Phys. Rev.* , 1988, **B38**: 3803.
- [8] S. W. Gu, Y. C. Li, L. F. Zheng, *Phys. Rev.* , 1989, **B39**: 1346.
- [9] Z. H. Huang *et al.* , *Chin. Phys. Lett.* , 1994, **11**: 754.
- [10] J. L. Xiao, B. Q. Sun, W. Xiao, *Phys. Status Solidi B(East Germany)* . , 1993, **176**: 117.
- [11] W. Xiao, B. Q. Sun, J. L. Xiao, *J. Phys. : Condens. Matter.* , 1996, **8**: 535.
- [12] J. L. Xiao, W. Xiao, *Phys. Rev.* , 1998, **B58**: 1678.
- [13] N. Tokuda, *J. Phys. C: Solid State Phys.* , 1980, **13**: L851.
- [14] G. Busch and H. Schade. *Lecture on Solid Physics*, Tr by Ferdinand Cap. Oxford, Pergamon, 1976.
- [15] E. Kartheuser, *Polaron in Ionic Crystals and Polar Semiconductors* (Amsterdam: Noth-Holland), 1972.