

晶格振动对激子运动的影响*1)

顾 世 清

(内 蒙 古 大 学)

提 要

在本文中用 Haga 研究极化子时提出的微扰法讨论晶格振动对激子运动的影响。把作者过去的工作推广到电子和空穴质量不相等的普遍情形。在忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用时,导出了激子的基态能量、有效质量、约化质量和内部势能。指出:激子的有效质量和电子、空穴与声子的相互作用有关;激子的约化质量不仅和电子、空穴与声子的相互作用有关,而且还和电子空穴质量比有关;激子形成自陷态的条件并非由电子、空穴与声子相互作用的大小,而是由电子、空穴质量比决定。形成激子自陷的条件是电子、空穴质量比 $0.261 < \frac{\mu_e}{\mu_h} < 3.83$, 在 $\frac{\mu_e}{\mu_h} < 0.261$ 或 $\frac{\mu_e}{\mu_h} > 3.83$ 的情形,激子在极化晶体中并不形成自陷态。

极化晶体价带中的电子吸收了能量小于禁带宽度的光子跃迁到激发态,被正电性的空穴借库仑作用而束缚住,这种电子空穴对称称为激子。激子的形成、运动和消失与光的吸收和辐射过程密切相关。

近年来,不少作者对激子和杂质原子的作用进行了研究。Lose 等人^[1]研究了束缚激子复合体的能量与激子中电子、空穴质量比 μ_e/μ_h 有关,当质量比的数值在 $0.46 \leq \mu_e/\mu_h \leq 0.576$ 的范围内,复合体是稳定的;否则是不稳定的。Pan 等人^[2]对激子受中性受主束缚的情形作了研究,计算出离解能作为电子、空穴质量比的函数,当质量比从 0.1 变到 1.0 时,离解能 E_d 与受主电离能 E_i 之比 E_d/E_i 从 0.075 变到 0.13。

作者曾对激子的性质就电子、空穴质量相等的情形作过分析^[3],现将其推广到质量不相等的情形导出了激子的基态能量、有效质量、约化质量和内部势能,发现激子的自陷能不仅与激子和声子的相互作用有关,而且也 and 电子、空穴质量比有关。自陷能是电子、空穴质量比的函数,当 $0.261 < \mu_e/\mu_h < 3.83$ 时,激子形成自陷;当 $\mu_e/\mu_h < 0.26$ 或 > 3.83 时,激子并不形成自陷。

我们采用 Haga^[4] 在研究极化子时提出的微扰法讨论激子。离子晶体中激子声子体

* 1978年9月11日收到。

1) 曾在1978年中国物理学年会上报告。

系的哈密顿量可以写成^[5]

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_2}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar\omega a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} \\
 & + \sum_{\mathbf{w}} [V_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}} (e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}_2} - e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}_1}) + V_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{w}}^+ (e^{-i\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}_2} - e^{-i\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}_1})], \\
 V_{\mathbf{w}} = & \frac{4\pi e}{V^{1/2}} \left(\frac{C\hbar\omega}{8\pi\omega^2} \right)^{1/2}, \quad V_{\mathbf{w}}^* = -\frac{4\pi e}{V^{1/2}} \left(\frac{C\hbar\omega}{8\pi\omega^2} \right)^{1/2}, \\
 C = & \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0},
 \end{aligned} \tag{1}$$

其中 $\mu_1, \mu_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ 分别为电子和空穴的有效质量和坐标矢量, ∇_1^2, ∇_2^2 分别为电子和空穴的坐标矢量的拉普拉斯算符. ϵ_∞ 为光学介电常数, ϵ_0 为静态介电常数, $\mathbf{w}$ 为声子的波矢, $a_{\mathbf{w}}^+$ 和 $a_{\mathbf{w}}$ 为声子的产生算符和湮灭算符, $\hbar$ 为狄拉克的普朗克常数, ω 为不计晶格纵光学支振动频率与波矢依赖性时声子的频率.

引进激子的质心坐标

$$\mathbf{R} = \beta_1 \mathbf{r}_1 + \beta_2 \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \tag{2}$$

$$\beta_1 = \mu_1/M, \quad \beta_2 = \mu_2/M, \quad M = \mu_1 + \mu_2.$$

将(1)式变为

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} + \sum_{\mathbf{w}} \hbar\omega a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} \\
 & + \sum_{\mathbf{w}} [V_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}\cdot\mathbf{R}} (e^{-i\beta_1 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} - e^{i\beta_2 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}}) \\
 & + V_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w}\cdot\mathbf{R}} (e^{i\beta_1 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} - e^{-i\beta_2 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}})].
 \end{aligned} \tag{3}$$

作么正变换

$$U_1(\mathbf{R}) = \exp \left[i \left(\mathbf{K} - \sum_{\mathbf{w}} \mathbf{w} a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} \right) \cdot \mathbf{R} \right]. \tag{4}$$

$$H^* = U_1^{-1} H U_1$$

$$\begin{aligned}
 H^* = & \frac{\hbar^2}{2M} \left(\mathbf{K} - \sum_{\mathbf{w}} \mathbf{w} a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} \\
 & + \sum_{\mathbf{w}} \hbar\omega a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} + \sum_{\mathbf{w}} [V_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}} (e^{-i\beta_1 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} - e^{i\beta_2 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}}) \\
 & + V_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{w}}^+ (e^{i\beta_1 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} - e^{-i\beta_2 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}})].
 \end{aligned} \tag{5}$$

将上式中第一项展开后,把(5)式分写为下列各项之和:

$$H^* = H_{ex}^* + H_0^* + H_1^* + H_2^*,$$

$$H_{ex}^* = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r},$$

$$\begin{aligned}
 H_0^* = & \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} (u^2 + w^2) + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \sum_{\mathbf{w}} [V_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}} (e^{-i\beta_1 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} - e^{i\beta_2 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}}) \\
 & + V_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{w}}^+ (e^{i\beta_1 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} - e^{-i\beta_2 \mathbf{w}\cdot\mathbf{r}})],
 \end{aligned} \tag{5'}$$

$$H_1^* = -\frac{\hbar^2}{M} \sum_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} \mathbf{K} \cdot \mathbf{w},$$

$$H_2^* = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{\mathbf{w} \neq \mathbf{w}'} \mathbf{w} \cdot \mathbf{w}' a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'}^+, a_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}'},$$

其中

$$\frac{\hbar^2 u^2}{2M} = \hbar \omega.$$

再作么正变换

$$U_2(r) = \exp \left\{ \sum_{\mathbf{w}} [a_{\mathbf{w}}^+ f_{\mathbf{w}}(r) - a_{\mathbf{w}} f_{\mathbf{w}}^*(r)] \right\}. \quad (6)$$

$$f_{\mathbf{w}}(r) = -\frac{2M}{\hbar^2} \frac{V_{\mathbf{w}}^*}{(u^2 + w^2)},$$

$$f_{\mathbf{w}}^*(r) = -\frac{2M}{\hbar^2} \frac{V_{\mathbf{w}}}{(u^2 + w^2)},$$

$$V_{\mathbf{w}} = V_{\mathbf{w}}(e^{-i\beta_1 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} - e^{i\beta_2 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}),$$

$$V_{\mathbf{w}}^* = V_{\mathbf{w}}^*(e^{i\beta_1 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} - e^{-i\beta_2 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}).$$

$$\mathcal{H} = U_2^{-1} H^* U_2 = \mathcal{H}_{ex} + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2, \quad (7)$$

$$\mathcal{H}_{ex} = U_2^{-1} H_{ex}^* U_2 = \mathcal{H}_{ex}^0 + \mathcal{H}_{ex}^1 + \mathcal{H}_{ex}^2, \quad (8)$$

其中

$$\mathcal{H}_{ex}^0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{8\pi r} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\mathbf{w}} \frac{w^2}{(u^2 + w^2)} |A_{\mathbf{w}}|^2, \quad (9)$$

$$\mathcal{H}_{ex}^1 = \frac{\hbar^2}{\mu} \sum_{\mathbf{w}} \frac{i\mathbf{w} \cdot \nabla_r}{u^2 + w^2} (a_{\mathbf{w}}^+ A_{\mathbf{w}}^* + a_{\mathbf{w}} A_{\mathbf{w}}), \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ex}^2 = & \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\mathbf{w}} \frac{w^2}{(u^2 + w^2)^2} [a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}}^+ (A_{\mathbf{w}}^*)^2 + 2a_{\mathbf{w}}^* a_{\mathbf{w}} |A_{\mathbf{w}}^*|^2 + a_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}} (A_{\mathbf{w}})^2] \\ & + \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\mathbf{w} \neq \mathbf{w}'} \frac{\mathbf{w} \cdot \mathbf{w}'}{(u^2 + w^2)^2} (a_{\mathbf{w}}^+ A_{\mathbf{w}}^* + a_{\mathbf{w}} A_{\mathbf{w}})(a_{\mathbf{w}'}^+ A_{\mathbf{w}'}^* + a_{\mathbf{w}'} A_{\mathbf{w}'}), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & U_2^{-1} H_0^* U_2 \\ = & \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} (u^2 + w^2) + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{2M}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{w}} \frac{|V_{\mathbf{w}}|^2}{(u^2 + w^2)}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = & U_2^{-1} H_1^* U_2 \\ = & -\frac{\hbar^2}{M} \sum_{\mathbf{w}} [a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} \mathbf{K} \cdot \mathbf{w} + a_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}} \mathbf{K} \cdot \mathbf{w} + a_{\mathbf{w}} f_{\mathbf{w}}^* \mathbf{K} \cdot \mathbf{w} + f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}} \mathbf{K} \cdot \mathbf{w}], \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = & U_2^{-1} H_2^* U_2 \\ = & \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{\mathbf{w} \neq \mathbf{w}'} \mathbf{w} \cdot \mathbf{w}' [a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'}^+ a_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}'} + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}}^* + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}'}^* \\ & + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'}^+ a_{\mathbf{w}} f_{\mathbf{w}} + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}'} + a_{\mathbf{w}} a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'}^* + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'} \\ & + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'} + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'} + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'} + a_{\mathbf{w}}^+ a_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'} \\ & + a_{\mathbf{w}}^+ f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}'} + a_{\mathbf{w}}^+ f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'} f_{\mathbf{w}'} + a_{\mathbf{w}} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'}^* f_{\mathbf{w}'} \\ & + a_{\mathbf{w}} f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'}^* f_{\mathbf{w}'} + f_{\mathbf{w}}^* f_{\mathbf{w}'}^* f_{\mathbf{w}} f_{\mathbf{w}'}], \end{aligned} \quad (14)$$

这里

$$\begin{aligned}
 A_w &= \frac{2M}{\hbar^2} V_w (\beta_1 e^{-i\beta_1 w \cdot r} + \beta_2 e^{i\beta_2 w \cdot r}); \\
 A_w^* &= \frac{2M}{\hbar^2} V_w^* (\beta_1 e^{i\beta_1 w \cdot r} + \beta_2 e^{-i\beta_2 w \cdot r}).
 \end{aligned} \quad (15)$$

(12)式中最后一项

$$\begin{aligned}
 & -\frac{2M}{\hbar^2} \sum_w \frac{|V_w|^2}{(u^2 + w^2)} \\
 &= -\frac{2M}{\hbar^2} \cdot \frac{16\pi^2 C \hbar \omega e^2}{8\pi V} \sum_w \frac{(e^{i\beta_1 w \cdot r} - e^{-i\beta_2 w \cdot r})(e^{-i\beta_1 w \cdot r} - e^{i\beta_2 w \cdot r})}{w^2(u^2 + w^2)} \\
 &= -\frac{4M e^2 C \omega}{\pi \hbar} \left[\int_0^\infty \frac{dw}{u^2 + w^2} - \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{\sin wr}{w(u^2 + w^2)} dw \right] \\
 &= -2\alpha \hbar \omega \left[1 - \frac{1}{ur} (1 - e^{-ur}) \right],
 \end{aligned} \quad (16)$$

其中

$$\alpha = \frac{M e^2}{\hbar^2 u} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right). \quad (17)$$

所以

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_0 &= \frac{\hbar^2}{2M} \sum_w a_w^\dagger a_w (u^2 + w^2) + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - 2\alpha \hbar \omega + \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{r} \\
 &\quad - \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{r} e^{-ur}.
 \end{aligned} \quad (18)$$

和(16)式的计算类似,(9)式中的

$$\begin{aligned}
 & \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_w \frac{w^2}{(u^2 + w^2)} |A_w|^2 \\
 &= \alpha \hbar \omega \frac{2Mu}{\pi \mu} (\beta_1^2 + \beta_2^2) \left[\int_0^\infty \frac{w^2 dw}{(u^2 + w^2)^2} + \frac{4u\beta_1\beta_2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{w \sin wr}{(u^2 + w^2)^2} dw \right] \\
 &= \alpha \hbar \omega \frac{M}{\mu} \left[\frac{1}{2} (\beta_1^2 + \beta_2^2) + \beta_1\beta_2 e^{-ur} \right].
 \end{aligned} \quad (19)$$

所以(9)式成为

$$\mathcal{H}_{ex}^0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} + \alpha \hbar \omega \frac{M}{\mu} \left[\frac{1}{2} (\beta_1^2 + \beta_2^2) + \beta_1\beta_2 e^{-ur} \right]. \quad (20)$$

在哈密顿量 $\mathcal{H}$ 中 $\mathcal{H}_0$ 和 $\mathcal{H}_{ex}^0$ 为未微扰部分, $\mathcal{H}_2$ 是由 H_2^* 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, 它比声子和激子的相互作用 H_1^* 小得多. $\mathcal{H}_{ex}^2$ 和 $\mathcal{H}_2$ 的数量级相同, 所以我们在忽略反冲效应中不同波矢的声子之间相互作用的近似下, 可以同时略去 $\mathcal{H}_2$ 和 $\mathcal{H}_{ex}^2$, 把 $(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_{ex}^1)$ 作为微扰项进行计算.

激子声子体系的未微扰基态波函数可写为 $\Phi_0 \phi(r)$, 其中 $\phi(r)$ 为归一化的激子波函数, Φ_0 为归一化的没有声子的“真空”声子波函数, 即

$$a_w \Phi_0 = 0, \quad a_w^\dagger \Phi_0 = \Phi(1_w), \quad (\Phi_0 | \Phi_0) = 1,$$

其中 $\Phi(1_w)$ 为有 1 个波矢为 w 的声子的波函数, 未微扰的基态能量由激子声子体系的未

微扰哈密顿量得到

$$(\phi^+(r)\Phi_0^+|\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ex}^0|\Phi\phi(r)) = (\phi^+(r)|H_{ex}(r)|\phi(r)), \quad (21)$$

$$H_{ex}(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} - \alpha\hbar\omega\left[2 - \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2}\right] + \alpha\hbar\omega e^{-ur} - \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)\frac{e^2}{r}e^{-ur}. \quad (22)$$

三

由微扰项($\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_{ex}^1$)引起的二级微扰量

$$\Delta E = -\sum \frac{|(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_{ex}^1)_{0n}|^2}{E_n - E_0}. \quad (23)$$

可以证明(见附录)

$$\begin{aligned} \Delta E &= -\sum \frac{|(\mathcal{H}_1)_{0n}|^2}{E_n - E_0} - \sum \frac{|(\mathcal{H}_{ex}^1)_{0n}|^2}{E_n - E_0} \\ &= (\Delta E)_1 + (\Delta E)_{ex}. \end{aligned} \quad (24)$$

进一步计算(见附录)得到

$$(\Delta E)_1 = -\frac{\alpha}{6} \frac{\hbar^2 K^2}{2M}, \quad (25)$$

$$(\Delta E)_{ex} = -\frac{\alpha}{3} \left(\frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right) \frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu}. \quad (26)$$

最后求得激子能量为

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2 K^2}{2M^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2\mu^*} + \alpha\hbar\omega \left(-2 + \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2} \right) - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} \\ &\quad - \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{r} e^{-ur} + \alpha\hbar\omega e^{-ur}, \end{aligned} \quad (27)$$

其中

$$M^* = \frac{M}{1 - \alpha/6}, \quad (28)$$

$$\mu^* = \frac{\mu}{1 + \frac{\alpha}{3} \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2}}. \quad (29)$$

(27) 式中第一项是激子的平动能, 第二项是激子内部运动的动能, 第三项是自陷能, 第四至第六项是激子内部的势能。晶格振动对激子的作用使电子、空穴对的库仑势能由 $-e^2/\epsilon_\infty r$ 变为 $-e^2/\epsilon_0 r$, 而且由于电子对晶格的极化而产生的反作用, 使电子所产生的电场被极化晶格所屏蔽; 同样对空穴亦然, 最后使电子、空穴势能由于极化晶格的屏蔽作用而产生了屏蔽势能 $-\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)\frac{e^2}{r}e^{-ur} + \alpha\hbar\omega e^{-ur}$ 。这些作用和电子、空穴质量的相对大小无关。这几项的结果和作者以前就电子和空穴质量相等的特殊情形所得的结果完全一样^[3]。第四项和第五项与 Тулюб^[6] 利用李政道^[7] 的变分法所得的结果相同。第六项是我

们对于屏蔽给出的修正项。

晶格振动对激子的作用使激子的有效质量 M 变为 $M^* = M/(1 - \alpha/6)$ 。这结果和作者过去的结果一样^[3], 这说明晶格振动对激子平动的影响, 只和它们的相互作用的强弱有关, 与电子和空穴的有效质量的总和有关, 而和电子、空穴质量的相对大小无关。

晶格振动对激子的作用使激子的约化质量 μ 变为 $\mu^* = \frac{\mu}{\left[1 + \frac{\alpha}{3} \left(\frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2}\right)\right]}$, 它随电

子、空穴质量的相对大小变化, 在电子、空穴质量相差愈悬殊, 约化质量将变得愈小, 而电子、空穴与声子的相互作用对激子内部运动的影响表现在电子、空穴与声子的相互作用愈强, 使得约化质量变得愈小, 在电子、空穴质量不相等的情形, 电子、空穴与声子的相互作用愈强, 愈助长了电子、空穴质量不等对约化质量的影响。

特别有趣的是晶格振动对激子自陷的影响, 由于晶格振动对激子的作用使激子的能量改变了。可以把晶格振动对激子自陷的影响分成两部分, 一部分与电子、空穴质量的相对大小无关, 另一部分与电子、空穴质量有关。在电子、空穴质量相等的情形 $\beta_1 = \beta_2 = \frac{1}{2}$, 和文献[3]中所得的结果一致。在电子、空穴质量不等的情形, 激子的能量由于晶格振动的作用而降低的数值, 即自陷能等于

$$\alpha\hbar\omega \left(2 - \frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1\beta_2}\right).$$

在电子、空穴质量不是相差很大的情形, 在 $0.207 < \beta_1 < 0.793$ 时, 激子发生自陷。在电子、空穴质量相差较大时, 即 $\beta_1 < 0.207$ 或 $\beta_1 > 0.793$ 时, 激子并不发生自陷, 其时晶格振动对激子的作用不但未使激子的能量降低, 反而升高了。由此可知, 当电子、空穴质量比小于 0.261 或大于 3.83 时激子不发生自陷现象, 只有在电子、空穴质量比 $0.261 < \frac{\mu_e}{\mu_h} < 3.83$ 时才发生自陷现象。顺便指出, 此处所说的电子的质量当然是电子在晶格场中运动的有效质量, 对空穴也是如此。

附 录

微扰项 $\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}'_{ex}$ 引起的二级微扰能量为

$$\Delta E = - \sum_n \frac{|\langle \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}'_{ex} \rangle_{0n}|^2}{E_n - E_0}. \quad (23)$$

根据(1),(6),(10),(13),(15)和(21)式得到

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_1)_{0n} &= \frac{4\pi e}{V^{1/2}} \left(\frac{C\hbar\omega}{8\pi}\right)^{1/2} \frac{ai}{u^2 + \omega^2} (e^{i\beta_1\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} - e^{-i\beta_1\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}}), \\ a &= -\frac{2\mathbf{K}\cdot\mathbf{w}}{\omega}, \end{aligned} \quad (A.1)$$

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}'_{ex})_{0n} &= \frac{4\pi e}{V^{1/2}} \left(\frac{C\hbar\omega}{8\pi}\right)^{1/2} \frac{b}{u^2 + \omega^2} (\beta_1 e^{i\beta_1\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}} + \beta_2 e^{-i\beta_2\mathbf{w}\cdot\mathbf{r}}), \\ b &= \frac{2M}{\mu} \frac{\nabla_{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{w}}{\omega}. \end{aligned} \quad (A.2)$$

将 (A.1), (A.2) 式代入(23)式得

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\frac{2M}{\hbar^2} \frac{(4\pi e)^2}{V} \frac{C\hbar\omega}{8\pi} \sum_{\mathbf{w}} \frac{1}{(u^2 + w^2)^3} |(b\beta_1 e^{i\beta_1 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} + b\beta_2 e^{-i\beta_2 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}) \\ &\quad + (aie^{i\beta_1 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} - aie^{-i\beta_2 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}})|^2 \\ &= (\Delta E)_1 + (\Delta E)_{ex} + (\Delta E)',\end{aligned}\quad (\text{A.3})$$

其中 $(\Delta E)_1$ 为(25)式, $(\Delta E)_{ex}$ 为(26)式, $(\Delta E)' = 0$, 现逐个予以证明.

$$\begin{aligned}(\Delta E)_1 &= -\sum_n |(\mathcal{E}_1)_{0n}|^2 \\ &= -\frac{2MC\omega}{8\pi\hbar} \frac{(8\pi e)^2}{V} K^2 \sum_{\mathbf{w}} \frac{\cos^2(\widehat{\mathbf{K} \cdot \mathbf{w}})}{(u^2 + w^2)^3} |e^{i\beta_1 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} - e^{-i\beta_2 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}|^2 \\ &= -\frac{2e^2 C}{\pi^2} u^2 K^2 \int_{\mathbf{w}} \frac{\cos^2(\widehat{\mathbf{K} \cdot \mathbf{w}})}{(u^2 + w^2)^3} [1 - \cos(\widehat{\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}})] d\mathbf{w}.\end{aligned}\quad (\text{A.4})$$

在计算上式时, 令

$$\begin{aligned}\mathbf{K} &= K\mathbf{k}^0, \quad \cos(\widehat{\mathbf{K} \cdot \mathbf{w}}) = \cos \theta, \\ \mathbf{r} &= (\sin \theta_0 \cos \phi_0 \mathbf{i}^0 + \sin \theta_0 \sin \phi_0 \mathbf{j}^0 + \cos \theta_0 \mathbf{k}^0) r, \\ \cos(\widehat{\mathbf{r} \cdot \mathbf{w}}) &= \cos \theta_0 \cos \theta + \sin \theta_0 \sin \theta \cos(\phi - \phi_0),\end{aligned}$$

因此 (A.4) 式等于

$$\begin{aligned}(\Delta E)_1 &= -\frac{2e^2 C}{\pi^2} u^2 K^2 \left[\int_{\mathbf{w}} \frac{\cos^2 \theta}{(u^2 + w^2)^3} d\mathbf{w} - \cos \theta_0 \int_{\mathbf{w}} \frac{\cos^3 \theta d\mathbf{w}}{(u^2 + w^2)^3} \right. \\ &\quad \left. - \sin \theta_0 \int_{\mathbf{w}} \frac{\cos^3 \theta \sin \theta \cos(\phi - \phi_0)}{(u^2 + w^2)^3} d\mathbf{w} \right].\end{aligned}$$

上式第二、三项等于零, 最后得到

$$(\Delta E)_1 = -\frac{\alpha}{6} \frac{\hbar^2 K^2}{2M}. \quad (25)$$

现在计算

$$\begin{aligned}(\Delta E)_{ex} &= -\sum_n \frac{|(\mathcal{E}'_{ex})_{0n}|^2}{E_n - E_0} \\ &= -\frac{2M}{\hbar^2} \left(\frac{2M}{\mu} \right)^2 \frac{(4\pi e)^2}{V} \cdot \frac{C\hbar\omega}{8\pi} \nabla_i^2 \sum_{\mathbf{w}} \frac{\cos^2(\widehat{\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{w}})}{(u^2 + w^2)^3} |\beta_1 e^{i\beta_1 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} + \beta_2 e^{-i\beta_2 \mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}|^2 \\ &= -\left(\frac{2M}{\mu} \right)^2 \frac{e^2 C}{4\pi^2} u^2 \nabla_i^2 \left[(\beta_1^2 + \beta_2^2) \int_{\mathbf{w}} \frac{\cos^2(\widehat{\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{w}}) d\mathbf{w}}{(u^2 + w^2)^3} \right. \\ &\quad \left. + 2\beta_1 \beta_2 \int_{\mathbf{w}} \frac{\cos^2(\widehat{\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{w}})}{(u^2 + w^2)^3} \cos(\widehat{\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}) d\mathbf{w} \right]\end{aligned}\quad (\text{A.5})$$

和计算 (A.4) 式类似, 可以得到

$$(\Delta E)_{ex} = -\frac{\alpha}{3} \left(\frac{\beta_1^2 + \beta_2^2}{2\beta_1 \beta_2} \right) \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2\mu}. \quad (26)$$

再计算 (A.3) 式中的第三项

$$(\Delta E)' = -\frac{4M}{\pi^2 \mu} \alpha \hbar \omega u \sum_{\mathbf{w}} \frac{\cos(\widehat{\mathbf{K} \cdot \mathbf{w}}) \cos(\widehat{\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{w}}) \sin(\widehat{\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}) d\mathbf{w}}{(u^2 + w^2)^3} \quad (\text{A.6})$$

令 (A.6) 式中的矢量的方向表示为

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &(0, 0, 1), \\ \mathbf{K} &(\sin \theta_1 \cos \varphi_1, \sin \theta_1 \sin \varphi_1, \cos \theta_1), \\ \nabla_{\mathbf{r}} &(\sin \theta_2 \cos \varphi_2, \sin \theta_2 \sin \varphi_2, \cos \theta_2), \\ \mathbf{w} &(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \\ \cos(\widehat{\mathbf{K} \cdot \mathbf{w}}) &= \cos \theta_1 \cos \theta + \sin \theta_1 \sin \theta \cos(\varphi - \varphi_1), \\ \cos(\widehat{\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{w}}) &= \cos \theta_2 \cos \theta + \sin \theta_2 \sin \theta \cos(\varphi - \varphi_2), \\ \sin(\widehat{\mathbf{r} \cdot \mathbf{w}}) &= \sin \theta \sin \varphi,\end{aligned}$$

代入 (A.6) 式得到

$$\begin{aligned}
(\Delta E)' = & -\frac{4M}{\pi^2\mu} \alpha h \omega u \int \frac{\omega^2 d\omega}{(u^2 + \omega^2)^3} \left[\cos \theta_1 \cos \theta_2 \iint \cos^2 \theta \sin^2 \theta \cos \varphi d\theta d\varphi \right. \\
& + \cos \theta_1 \sin \theta_2 \iint \cos \theta \sin^3 \theta \cos(\varphi - \varphi_2) \cos \varphi d\theta d\varphi \\
& + \sin \theta_1 \cos \theta_2 \iint \sin^3 \theta \cos \theta \cos(\varphi - \varphi_1) d\theta d\varphi \\
& \left. + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \iint \sin^4 \theta \cos(\varphi - \varphi_1) \cos(\varphi - \varphi_2) \cos \varphi d\theta d\varphi \right] = 0.
\end{aligned}$$

上式各积分中 θ, φ 的积分限为 $\theta(0, \pi), \varphi(0, 2\pi)$, 前三项很明显地可看出它们等于零, 最后一项只要余弦函数展开后立即能看出它也等于零, 由此(24)式得证。

参 考 文 献

- [1] P. Lose, M. Wohlecke, *Phys. Status. Solidi*, **B73** (1976), 265.
- [2] D. S. Pan, D. L. Smith, T. C. McGill, *Solid. Stat. Commun.*, **18** (1976), 1157.
- [3] 顾世清, 内蒙古大学学报(自然科学), 第一期 (1963), 57.
- [4] E. Haga, *Prog. Theor. Phys.*, **11** (1954), 449.
- [5] И. М. Дыкман, *Ж.Т.Ф.*, **8** (1957), 1731.
- [6] А. В. Тулуб, *ЖЭТФ*, **34** (1958), 1641.
- [7] T. D. Lee (李政道), F. E. Low, D. Pines, *Phys. Rev.*, **90** (1953), 297.

THE EFFECT OF THE LATTICE VIBRATION ON THE EXCITON MOTION

KU SHIH-WEI

(Neimenggu University)

ABSTRACT

In this paper, the effect of the lattice vibration on the exciton motion is discussed by a perturbation method that was developed to investigate the problem of polarons by Haga. Our previous work is generalized to the case that the electron mass and the hole mass are not equal. When we neglect the interaction between phonons of different wave vector in the recoil process, the ground state energy, effective mass, reduced mass and inner potential energy are derived. It is shown that the effective mass of the exciton depends on the interaction between the electron, hole and the phonons reduced mass of the exciton not only depends on the interaction between the electron, hole and the phonons, but also on the electron and hole mass ratio; the formation of a self trapping exciton is not determined by the magnitude of the interaction between the electron, hole and the phonon, but by the electron and hole mass ratio. A exciton is self trapping when the electron and hole mass ratio is in the range $0.261 < \mu_e/\mu_h < 3.83$.