第 29 卷 第 10 期　　物 理 学 报　　Vol. 29, No. 10
1980 年 10 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Oct., 1980

极性晶体中慢激子极化势的性质

顾 世 洧
(内 蒙 古 大 学)

1979 年 5 月 28 日收到

提　　要

本文讨论极性晶体中慢激子极化势的性质，把作者过去的工作推广到电子和空穴质量不相等的情形．采用微扰法，在忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用后，计算了二级近似的波函数．由此进一步计算了慢激子的极化电势，发现：激子的极化电势受到纵光学声子的屏蔽，其屏蔽长度与纵光学声子的频率、激子的质量的平方根成反比；极化电势和电子、空穴质量有关，在电子、空穴质量比等于 1 时最小．

一、引　言

激子中的电子对晶体极化，被极化的晶体反过来对电子有反作用；同样对激子中的空穴亦然，空穴对晶体极化，被极化的晶体对空穴亦有反作用．从激子和声子的作用能对声子波函数的平均值可以导出激子在晶体中产生的极化电势．作者曾对极性晶体中的激子，采用微扰法[1]，在忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用后，计算了二级近似的声子波函数，导出了慢激子的极化电势．现在将文献[1]推广到电子和空穴质量不相等的情形，再计算二级近似的声子波函数，导出慢激子的极化电势，进一步分析在极性晶体中慢激子极化势的性质．

二、哈 密 顿 量

极性晶体中激子声子系的哈密顿量可以写为[2]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_2}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} + \sum_{\boldsymbol{w}} \hbar\omega\, a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}}$$

$$+ \sum_{\boldsymbol{w}} [V_w a_{\boldsymbol{w}} (e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_2} - e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_1}) + V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+ (e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_2} - e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_1})],$$

$$V_w = \frac{4\pi ie}{V^{1/2}}\left(\frac{C\hbar\omega}{8\pi w^2}\right)^{1/2},\ V_w^* = -\frac{4\pi ie}{V^{1/2}}\left(\frac{C\hbar\omega}{8\pi w^2}\right)^{1/2},\ C = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}, \tag{1}$$

其中 μ_1, μ_2, $\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2$ 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，$\boldsymbol{w}$ 为声子的波矢， $a_{\boldsymbol{w}}^+$ 和 $a_{\boldsymbol{w}}$ 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

$$\boldsymbol{R} = \beta_1\boldsymbol{r}_1 + \beta_2\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \beta_1 = \mu_1/M, \beta_2 = \mu_2/M, M = \mu_1 + \mu_2. \tag{2}$$

(1) 式变为

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

作么正变换

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

$$H^* = U_1^{-1}HU_1 = \frac{\hbar^2}{2M}\left(K - \sum_{\boldsymbol{w}} w a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} + \sum_{\boldsymbol{w}} \hbar\omega a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}} + \sum_{\boldsymbol{w}} [V_w a_{\boldsymbol{w}} (e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} - e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}}) + V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+ (e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} - e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}})]. \tag{5}$$

将上式第一项展开时，忽略反冲效应中不同波矢的声子之间的相互作用 $\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{\boldsymbol{w}}\sum_{\boldsymbol{w}'}{}' \boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{w}' a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}'}^+ a_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}'}$，并考虑到在 V 很大的情形下可以 $a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}}$ 代替 $a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}}$，(5)式就变为

$$H^* = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{\hbar^2}{2M}\sum_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}} (w^2 + u^2) + \sum_{\boldsymbol{w}} [V_w a_{\boldsymbol{w}} (e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} - e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}}) + V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+ (e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} - e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}})] - \frac{\hbar^2}{M}\sum_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}, \tag{6}$$

式中

$$\frac{\hbar^2 u^2}{2M} = \hbar\omega. \tag{7}$$

再作么正变换

$$U_2(\boldsymbol{r}) = \exp\left\{\sum_{\boldsymbol{w}} [a_{\boldsymbol{w}}^+ f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{r}) - a_{\boldsymbol{w}} f_{\boldsymbol{w}}^*(\boldsymbol{r})]\right\}, \quad f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{r}) = -\frac{2M}{\hbar^2}\frac{\mathrm{V}_{\boldsymbol{w}}^*}{(w^2 + u^2)},$$

$$f_{\boldsymbol{w}}^*(\boldsymbol{r}) = -\frac{2M}{\hbar^2}\frac{\mathrm{V}_{\boldsymbol{w}}}{(w^2 + u^2)}, \quad \mathrm{V}_{\boldsymbol{w}} = V_w (e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} - e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}}),$$

$$\mathrm{V}_{\boldsymbol{w}}^* = V_w^* (e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} - e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}}). \tag{8}$$

将(6)式变为

$$\mathscr{H} = U_2^{-1}H^*U_2 = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1, \tag{9}$$

$$\mathscr{H}_0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty r} + \frac{\hbar^2}{2M}\sum_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}} (w^2 + u^2) - \frac{2M}{\hbar^2}\frac{|\mathrm{V}_{\boldsymbol{w}}|^2}{w^2 + u^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{\boldsymbol{w}} \frac{|A_{\boldsymbol{w}}|^2 w^2}{w^2 + u^2}, \tag{10}$$

$$\mathscr{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{M}\sum_{\boldsymbol{w}} [a_{\boldsymbol{w}}^+ a_{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w} + a_{\boldsymbol{w}}^+ f_{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w} + a_{\boldsymbol{w}} f_{\boldsymbol{w}}^* \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}] + \frac{i\hbar^2}{\mu}\sum_{\boldsymbol{w}} \frac{\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{w^2 + u^2} (A_{\boldsymbol{w}}^* a_{\boldsymbol{w}}^+ + A_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}}), \tag{11}$$

式中

$$A_{\boldsymbol{w}} = \frac{2M}{\hbar^2} V_w (\beta_1 e^{-i\beta_1 \boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} + \beta_2 e^{i\beta_2 \boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}}),$$

$$A^*_{\boldsymbol{w}} = \frac{2M}{\hbar^2} V^*_w (\beta_1 e^{i\beta_1 \boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}} + \beta_2 e^{-i\beta_2 \boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}}). \qquad (12)$$

(9) 式中略去了 $\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{\boldsymbol{w}} \frac{w^2}{(w^2+u^2)^2}(A^*_{\boldsymbol{w}} a^+_{\boldsymbol{w}} + A_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}})^2 + \frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{\boldsymbol{w}}\sum_{\boldsymbol{w}'}{}' \frac{\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{w}'}{(w^2+u^2)^2}(A^*_{\boldsymbol{w}} a^+_{\boldsymbol{w}} + A_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}})(A^*_{\boldsymbol{w}'} a^+_{\boldsymbol{w}'} + A_{\boldsymbol{w}'} a_{\boldsymbol{w}'})$ 和 $-\frac{\hbar^2}{M}\sum_{\boldsymbol{w}} f^*_{\boldsymbol{w}} f_{\boldsymbol{w}} \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}$，当晶体充分大时，这些项是可以忽略的.

计算(10)式中最后两项时可参照文献[3]中计算(16)和(19)式时所用的方法，最后可得

$$\mathscr{H}_0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2M}\sum_{\boldsymbol{w}} a^+_{\boldsymbol{w}} a_{\boldsymbol{w}} (w^2+u^2)$$
$$- \alpha\hbar\omega\left(2 - \frac{\beta_1^2+\beta_2^2}{2\beta_1\beta_2}\right) + \alpha\hbar\,\omega e^{-ur} - \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)\frac{e^2}{r} e^{-ur}. \qquad (13)$$

对于慢激子，$\mathscr{H}_1$ 和 $\mathscr{H}_0$ 相比，可以看成微扰. 过去作者曾经用这种微扰法计算了激子的有效哈密顿量[4]，找到了激子的有效质量与电子声子作用量 α 之间的关系：$M^* = M(1-\alpha/6)^{-1}$. 这个结果和 Haga[5] 对极性晶体中慢电子计算的结果相似，所以本文仍采用这种微扰法进行计算.

三、波 函 数

按通常的微扰法，精确到二级近似，波函数

$$\phi = \phi_0 + \phi_1 + \phi_2, \qquad (14)$$

$$\phi_1 = -\sum_n{}' \frac{(\mathscr{H}_1)_{n0}}{E_n - E_0}, \qquad (15)$$

$$\phi_2 = \sum_n C_n \phi_n, \qquad (16)$$

$$C_0 = -\frac{1}{2}\sum_{n\neq 0}{}' \frac{(\mathscr{H}_1)_{0n}(\mathscr{H}_1)_{n0}}{E_n^0}, \qquad (17)$$

$$C_n = \sum_{(k\neq 0)}{}' \frac{(\mathscr{H}_1)_{nk}(\mathscr{H}_1)_{k0}}{E_n - E_k} \qquad n \neq 0, \qquad (18)$$

式中 ϕ_0 代表真空声子态，只要对哈密顿量(9)式中的微扰项(11)式计算出各个矩阵元，就可以得到波函数(见附录一)

$$\phi = \left[1 - 2\sum_{\boldsymbol{w}} \frac{f^*_{\boldsymbol{w}} f_{\boldsymbol{w}} (\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w})^2}{(w^2+u^2)^2} + \frac{2M^2}{\mu^2}\sum_{\boldsymbol{w}} \frac{A^*_{\boldsymbol{w}} A_{\boldsymbol{w}} (\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r)^2}{(w^2+u^2)^4}\right.$$
$$\left. + 2i\frac{M}{\mu}\sum_{\boldsymbol{w}} \frac{(f^*_{\boldsymbol{w}} A^*_{\boldsymbol{w}} + f_{\boldsymbol{w}} A_{\boldsymbol{w}})\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^3}\right]\phi_0$$

$$+\sum_{\boldsymbol{w}}\frac{f_{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}}{w^2+u^2}\phi(1_{\boldsymbol{w}})-\frac{2iM}{\mu}\sum_{\boldsymbol{w}}\frac{A_{\boldsymbol{w}}^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^2}\phi(1_{\boldsymbol{w}})$$
$$+4\sum_{\boldsymbol{w}}\frac{f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w})^2}{(w^2+u^2)^2}\phi(1_{\boldsymbol{w}})-\frac{4iM}{\mu}\sum_{\boldsymbol{w}}\frac{A_{\boldsymbol{w}}^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^3}\phi(1_{\boldsymbol{w}})$$
$$+4\sum_{\boldsymbol{w}}\sum_{\boldsymbol{w}'}{}'\frac{f_{\boldsymbol{w}}f_{\boldsymbol{w}'}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'}{(w^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_{\boldsymbol{w}},1_{\boldsymbol{w}'})$$
$$-\frac{4iM}{\mu}\sum_{\boldsymbol{w}}\sum_{\boldsymbol{w}'}{}'\frac{f_{\boldsymbol{w}}A_{\boldsymbol{w}'}^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)(w'^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_{\boldsymbol{w}},1_{\boldsymbol{w}'})$$
$$-\frac{4iM}{\mu}\sum_{\boldsymbol{w}}\sum_{\boldsymbol{w}'}{}'\frac{f_{\boldsymbol{w}'}A_{\boldsymbol{w}}^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_{\boldsymbol{w}},1_{\boldsymbol{w}'})$$
$$-\frac{4M^2}{\mu^2}\sum_{\boldsymbol{w}}\sum_{\boldsymbol{w}}{}'\frac{A_{\boldsymbol{w}}^*A_{\boldsymbol{w}'}^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^2(w'^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_{\boldsymbol{w}},1_{\boldsymbol{w}'}). \tag{19}$$

四、极化电势

(1) 式中最后一项是激子和声子系的相互作用能，对声子波函数求平均后，就得到激子在极性晶体中产生的极化电势．以 $\boldsymbol{r}_{1e}$, $\boldsymbol{r}_{2e}$ 代表激子中电子和空穴的坐标矢量，激子和极性晶格的相互作用能为

$$\sum_{\boldsymbol{w}}[V_w a_{\boldsymbol{w}}(e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_2}-e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_1})+V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+(e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_2}-e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_1})]. \tag{20}$$

换到质心坐标系，上式变为

$$\sum_{\boldsymbol{w}}[V_w a_{\boldsymbol{w}}e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{R}_e}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e}-e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})$$
$$+V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{R}_e}(e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e}-e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})], \tag{21}$$

式中 $\boldsymbol{R}_e$, $\boldsymbol{r}_e$ 为激子的质心坐标和电子、空穴相对坐标矢量，将(20)式除以电子电荷 e 再对声子波函数(19)式求平均，得到

$$\varphi(\boldsymbol{r}_{1e},\boldsymbol{r}_{2e};\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=e^{-1}\Big(\phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2),\Big\{\sum_{\boldsymbol{w}}[V_{\boldsymbol{w}}a_{\boldsymbol{w}}(e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_{2e}}-e^{i\boldsymbol{w}\boldsymbol{r}_{1e}})$$
$$+V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+(e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_{2e}}-e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_{1e}})]\Big\}\phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Big). \tag{22}$$

换为质心坐标，上式成为

$$\varphi(\boldsymbol{R}_e,\boldsymbol{r}_e;\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})=e^{-1}\Big(\phi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}),\Big\{\sum_{\boldsymbol{w}}[V_w a_{\boldsymbol{w}}e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{R}_e}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e}-e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})$$
$$+V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{R}_e}(e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e}-e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})]\Big\}\phi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\Big), \tag{23}$$

式中 $\phi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})=U_1(\boldsymbol{R})U_2(\boldsymbol{r})\phi$，$\phi$ 已在(19)式中给出，注意到

$$U_1^{-1}a_{\boldsymbol{w}}^+U_1=a_{\boldsymbol{w}}^+e^{i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{R}},\qquad U_1^{-1}a_{\boldsymbol{w}}U_1=a_{\boldsymbol{w}}e^{-i\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{R}},$$
$$U_2^{-1}a_{\boldsymbol{w}}^+U_2=a_{\boldsymbol{w}}^++f_{\boldsymbol{w}}^*(\boldsymbol{r}),\qquad U_2^{-1}a_{\boldsymbol{w}}U_2=a_{\boldsymbol{w}}+f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{r}). \tag{24}$$

则(23)式变为

$$\varphi(\boldsymbol{R}_e, \boldsymbol{r}_e; \boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}) = e^{-1}\Big(\phi, \Big\{\sum_{\boldsymbol{w}} [V_w f_{\boldsymbol{w}} e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})$$

$$+ V_w^* f_{\boldsymbol{w}}^* e^{-i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})]\Big\}\phi\Big)$$

$$+ e^{-1}\Big(\phi, \Big\{\sum_{\boldsymbol{w}} [V_w a_{\boldsymbol{w}} e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})$$

$$+ V_w^* f_{\boldsymbol{w}}^* e^{-i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})]\Big\}\phi\Big). \tag{25}$$

我们所要求的是在极性晶体中激子（其中电子、空穴分别位于 $\boldsymbol{r}_{1e}$, $\boldsymbol{r}_{2e}$）由于对晶体的极化所激发的电场中某处 R 的静电势，它应该等于

$$\varphi(\boldsymbol{R}_e, \boldsymbol{r}_e; \boldsymbol{R}) = \lim_{r\to 0}\varphi(\boldsymbol{R}_e, \boldsymbol{r}_e; \boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}). \tag{26}$$

根据(18)式中 $f_{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{r})$ 和 $f_{\boldsymbol{w}}^*(\boldsymbol{r})$ 的表达式，以及(26)式的要求，则由(25)、(26)式可得到

$$\varphi(\boldsymbol{R}_e, \boldsymbol{r}_e; \boldsymbol{R}) = e^{-1}\Big((\phi)_0, \Big\{\sum_{\boldsymbol{w}} [V_w a_{\boldsymbol{w}} e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})$$

$$+ V_w^* a_{\boldsymbol{w}}^+ e^{-i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})]\Big\}(\phi)_0\Big), \tag{27}$$

式中 $(\phi)_0$ 是 ϕ 在 $r\to 0$ 的极限，即 $(\phi)_0 = \lim_{r\to 0}\phi$. 将(19)式代入上式，经过冗长的计算(见附录二)，最后得到激子的极化电势为

$$\varphi = \frac{M}{\mu} e\left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)|\nabla_r|\Big[-\cos\theta_1\Big(e^{-u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{1e}|} + \frac{2}{u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{1e}|}e^{-u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{1e}|}$$

$$+ \frac{2}{u^2|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{1e}|^2}e^{-u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{1e}|}\Big) + \cos\theta_2\Big(e^{-u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{2e}|} + \frac{2}{u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{2e}|}e^{-u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{2e}|}$$

$$+ \frac{2}{u^2|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{2e}|^2}e^{-u|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{2e}|}\Big)\Big], \tag{28}$$

式中 θ_1 是 ∇_r 与 $\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{1e}$ 之间的夹角，θ_2 是与 $\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_{2e}$ 之间的夹角，M 是激子的质心质量，μ 为约化质量. 从(28)式可以看到，激子在极性晶体中产生的极化电势具有下述性质:

激子的极化电势与电子、空穴的相对运动有关，相对动量的数值愈大（与 $|\nabla_r|$ 成正比），极化电势愈大.

激子的极化电势与晶格振动有关，它受到纵光学声子的屏蔽，其屏蔽长度 u^{-1}（根据(7)式，$u^{-1} = \hbar^{\frac{1}{2}}(2M\omega)^{-\frac{1}{2}}$）与纵光学声子的频率、激子质量的平方根成反比.

激子的极化电势与电子、空穴质量比有关，因为

$$\frac{M}{\mu} = \frac{(\mu_1+\mu_2)^2}{\mu_1\mu_2} = 2 + \sigma + \frac{1}{\sigma}, \tag{29}$$

式中 $\sigma = \mu_1/\mu_2$ 为电子、空穴质量比，激子的极化电势在电子、空穴质量相等 $(\sigma = 1)$ 时最小，并随 σ 对 1 的偏离而单调地增大. 在电子、空穴质量相等的情形，$M/\mu = 4$, (28)式归结为文献[1]所得的结果.

另外，激子的极化电势与晶体的光学性质有关，与晶体的光学介电常数 ϵ_∞ 和静电介电常数 ϵ_0 有关.

最后还应指出的是激子处在球对称的 s 态时，极化势对 s 态的平均值等于零，当激子处在不对称的状态时，极化电势才平均地不等于零.

附 录 一

微扰项

$$\mathscr{H}_1=-\frac{\hbar^2}{M}\sum_w\left[a_w^+a_w\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}+a_w^+f_w\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}+a_wf_w^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\right]+\frac{i\hbar^2}{\mu}\sum_w\frac{\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{w^2+u^2}(A_w^*a_w^++A_wa_w). \tag{11}$$

先计算

$$\mathscr{H}_1\phi_0=-\frac{\hbar^2}{M}\sum_w f_w\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\phi(1_w)+\frac{i\hbar^2}{\mu}\sum_w\frac{A_w^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{w^2+u^2}\phi(1_w). \tag{A.1}$$

由此计算出下列各矩阵元:

$$(\mathscr{H}_1)_{00}=0, \tag{A.2}$$

$$(\mathscr{H}_1)_{10}=-\frac{\hbar^2}{M}f_w\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}+\frac{i\hbar^2}{\mu}\frac{A_w^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{w^2+u^2}, \tag{A.3}$$

$$(\mathscr{H}_1)_{20}=0. \tag{A.4}$$

以后各个矩阵元 $(\mathscr{H}_1)_{n0}$ $(n>2)$ 均为零，将 (A.2), (A.3), (A.4) 式代入(15)式，得到波函数的一级修正项

$$\phi_1=2\sum_w\frac{f_w\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}}{w^2+u^2}\phi(1_w)-\frac{2iM}{\mu}\sum_w\frac{A_w^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^2}\phi(1_w). \tag{A.5}$$

再由(11)式计算

$$\begin{aligned}(\mathscr{H}_1)\phi(1_w)=&-\frac{\hbar^2}{M}f_w^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\phi_0+\frac{i\hbar^2}{\mu}\frac{\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{w^2+u^2}A_w\phi_0-\frac{\hbar^2}{M}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\phi(1_w)\\&-\frac{\hbar^2}{M}{\sum_{w'}}'f_{w'}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'\phi(1_w,1_{w'})+\frac{i\hbar^2}{\mu}{\sum_{w'}}'\frac{\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{w'^2+u^2}A_{w'}^*\phi(1_w,1_{w'}).\end{aligned} \tag{A.6}$$

从而可算出下列各矩阵元:

$$(\mathscr{H}_1)_{01}=-\frac{\hbar^2}{M}f_w^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}+\frac{i\hbar^2}{\mu}\frac{A_w}{w^2+u^2}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r, \tag{A.7}$$

$$(\mathscr{H}_1)_{11}=-\frac{\hbar^2}{M}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}, \tag{A.8}$$

$$(\mathscr{H}_1)_{21}=-\frac{\hbar^2}{M}f_w\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}+\frac{i\hbar^2}{\mu}\frac{A_w^*}{w^2+u^2}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r. \tag{A.9}$$

将以上各个矩阵元代入(17),(18)式得到

$$\begin{aligned}C_0=&-2\frac{f_w^*f_w}{(w^2+u^2)^2}(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w})^2+\frac{2iM}{\mu}\frac{f_w^*A_w^*+f_wA_w}{(w^2+u^2)^3}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r\\&+\frac{2M^2}{\mu^2}\frac{A_w^*A_w}{(w^2+u^2)^4}(\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r)^2.\end{aligned} \tag{A.10}$$

$$C_1=\frac{4f_w}{(w^2+u^2)^2}(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w})^2-4i\frac{M}{\mu}\frac{A_w^*}{(w^2+u^2)^3}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r, \tag{A.11}$$

$$\begin{aligned}C_2=&\frac{4f_wf_{w'}}{(w^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'\\&-\frac{4iM}{\mu}\frac{f_wA_{w'}^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)(w'^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\\&-\frac{4iM}{\mu}\frac{f_{w'}A_w^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^2(w^2+w'^2+2u^2)}.\end{aligned} \tag{A.12}$$

再将 (A.10), (A.11), (A.12) 式代入(16)式，得到

$$\phi_2 = \Big[-2\sum_w \frac{f_w^* f_w (\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w})^2}{(w^2+u^2)^2} + \frac{2iM}{\mu}\sum_w \frac{(f_w^* A_w^* + f_w A_w)\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{ww}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^3}$$

$$+\frac{2M^2}{\mu^2}\sum_w \frac{A_w^* A_w(\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r)^2}{(w^2+u^2)^4}\Big]\phi_0$$

$$+4\sum_w \frac{f_w(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w})^2}{(w^2+u^2)^2}\phi(1_w) - \frac{4iM}{\mu}\sum_w \frac{A_w^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{ww}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^3}\phi(1_w)$$

$$+4\sum_w\sum_{w'}{}' \frac{f_w f_{w'}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'}{(w^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_w, 1_{w'})$$

$$-\frac{4iM}{\mu}\sum_w\sum_{w'}{}' \frac{A_w f_{w'}^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{ww}'\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)(w'^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_w, 1_{w'})$$

$$-\frac{4iM}{\mu}\sum_w\sum_{w}{}' \frac{A_w^* f_{w'}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{ww}'\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)(w'^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_w, 1_{w'})$$

$$-\frac{4M^2}{\mu^2}\sum_w\sum_{w'}{}' \frac{A_w^* A_{w'}^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^2(w'^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_w, 1_{w'}). \qquad (A.13)$$

将 (A.5), (A.13) 式代入(14)式，即得所求的二级近似波函数(19)式.

附　录　二

由于计算极化势的过程过于冗长，现择其要点简述于下：

为了计算 $\varphi(\boldsymbol{R}_e, \boldsymbol{r}_e; \boldsymbol{R})$，对照(27)式便得知应先计算 $a_w(\phi)_0$ 和 $a_w^+(\phi)_0$，

$$a_w(\phi)_0 = -\frac{2iM}{\mu}\frac{A_w^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^2}\phi_0 - \frac{4iM}{\mu}\frac{A_w^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{ww}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^3}\phi_0$$

$$-\frac{4M^2}{\mu^2}\sum_{w'}{}' \frac{A_w^* A_{w'}^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)(w'^2+u^2)(w^2+w'^2+2u^2)}\phi(1_{w'}). \qquad (A.14)$$

$$a_w^+(\phi)_0 = \Big[1 + \frac{2M^2}{\mu^2}\sum_w \frac{A_w^* A_w(\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r)^2}{(w^2+u^2)^4}\Big]\phi(1_w)$$

$$-\frac{2iM}{\mu}\sum_{w'}{}' \frac{A_{w'}^*\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{(w'^2+u^2)^2}\phi(1_w, 1_{w'})$$

$$-\frac{4iM}{\mu}\sum_{w'}{}' \frac{A_{w'}^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r}{(w'^2+u^2)^3}\phi(1_w, 1_{w'}). \qquad (A.15)$$

将 (A.14), (A.15) 式和(19)式代入(27)式，得到

$$e\varphi(\boldsymbol{R}_e, \boldsymbol{r}_e; \boldsymbol{R}) = \Big\{\sum_w V_w e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})\Big[-\frac{2iM}{\mu}\frac{A_w^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^2}$$

$$-\frac{4iM}{\mu}\frac{A_w^*\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{ww}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^3} - \frac{4iM^3}{\mu^3}\frac{(A_w^*)^2 A_w(\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r)^3}{(w^2+u^2)^6}$$

$$-\frac{8iM^3}{\mu^3}\frac{(A_w^*)^2 A_w\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}(\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r)^3}{(w^2+u^2)^7}\Big]$$

$$+\sum_w\sum_{w'}{}' V_w e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e} - e^{-i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})$$

$$\times\Big[\frac{8iM^3}{\mu^3}\frac{A_w^*(A_{w'}^*)^2\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r(\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r)^2}{(w^2+u^2)(w'^2+u^2)^3(w^2+w'^2+2u^2)}$$

$$+\frac{16iM^3}{\mu^3}\frac{A_w^*(A_{w'}^*)^2\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{w}'\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r(\boldsymbol{w}'\cdot\nabla_r)^2}{(w^2+u^2)^2(w'^2+u^2)^4(w^2+w'^2+2u^2)}\Big]\Big\} + \{\text{c.c.}\}. \qquad (A.16)$$

上式中 {c.c.} 表示与前面括号中各项相应的复共轭.

对于慢激子，只要取 (A.16) 式中动量的一次方即可，其余包括动量二次方以上的项均可略去，因此，(A.16) 式

中只需取第一项及其复共轭即可，将(1)式中的 V_w 代入 (A.16) 式中的第一项，对充分大的晶体，可以将对声子波矢 w 的和代以积分

$$\sum_{w} \{\cdots\} = \frac{V}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{w}. \tag{A.17}$$

(A.16) 式中的第一项

$$\sum_{w} V_w e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{R}_e-\boldsymbol{R})}(e^{-i\beta_1\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e}-e^{i\beta_2\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{r}_e})\left(-\frac{2iM}{\mu}\frac{A_w^*\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r}{(w^2+u^2)^3}\right)$$

$$= \frac{iM^2e^2c\omega}{\pi^4\hbar\mu}\left[\iiint\frac{e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{r}_{2e}-\boldsymbol{R})}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r\sin\theta}{(w^2+u^2)^2}\,dwd\theta d\varphi - \iiint\frac{e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R})}\,\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r\sin\theta}{(w^2+u^2)^2}\,dwd\theta d\varphi\right]. \tag{A.18}$$

上式中的积分限为 $w(0,\infty)$, $\theta(0,\pi)$, $\varphi(0,2\pi)$, 对于上式中出现的积分，可按下述方法求得.

设 (A.18) 式中第二个积分中出现的各矢量的方向为

$$(\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R})(0,0,1)\quad \nabla_r(\sin\theta_1\cos\varphi_1,\ \sin\theta_1\sin\varphi_1,\ \cos\theta_1)\ \boldsymbol{w}(\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\varphi) \tag{A.19}$$

那末

$$I_2 = \iiint\frac{e^{i\boldsymbol{w}\cdot(\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R})}\boldsymbol{w}\cdot\nabla_r\sin\theta}{(w^2+u^2)^2}\,dwd\theta d\varphi$$

$$= \iiint\frac{e^{i|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|w\cos\theta}|\nabla_r|w}{(w^2+u^2)^2}[\cos\theta_1\cos\theta+\sin\theta_1\sin\theta\cos(\varphi-\varphi_1)]\sin\theta dwd\theta d\varphi. \tag{A.20}$$

式中方括号内第二项的积分为零，因此上式等于

$$I_2 = \iiint\frac{e^{i|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|w\cos\theta}|\nabla_r|w\cos\theta_1\cos\theta\sin\theta}{(w^2+u^2)^2}\,dwd\theta d\varphi$$

$$= -4\pi i|\nabla_r|\cos\theta_1\left[\int_0^\infty\frac{\cos(|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|w)}{|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|(w^2+u^2)^2}dw - \int_0^\infty\frac{\sin(|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|w)}{|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|^2w(w^2+u^2)^2}dw\right]. \tag{A.21}$$

应用留数定理计算得到 (A.18) 式中第二个积分 I_2 等于

$$I_2 = -4\pi i|\nabla_r|\cos\theta_1\left[\frac{\pi}{4u^2}e^{-u|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|}+\frac{\pi}{2u^3|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|}e^{-u|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|}+\frac{\pi}{2u^4|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|^2}e^{-u|\boldsymbol{r}_{1e}-\boldsymbol{R}|}\right]. \tag{A.22}$$

类似地可得到 (A.18) 式中第一个积分 I_1 等于

$$I_1 = \iiint\frac{e^{i|\boldsymbol{r}_{2e}-\boldsymbol{R}|w\cos\theta}|\nabla_r|w\cos\theta_2\cos\theta\sin\theta}{(w^2+u^2)^2}\,dwd\theta d\varphi$$

$$= -4\pi i|\nabla_r|\cos\theta_2\left[\frac{\pi}{4u^2}e^{-u|\boldsymbol{r}_{2e}-\boldsymbol{R}|}+\frac{\pi}{2u^3|\boldsymbol{r}_{2e}-\boldsymbol{R}|}e^{-u|\boldsymbol{r}_{2e}-\boldsymbol{R}|}+\frac{\pi}{2u^4|\boldsymbol{r}_{2e}-\boldsymbol{R}|^2}e^{-u|\boldsymbol{r}_{2e}-\boldsymbol{R}|}\right]. \tag{A.23}$$

将 (A.22), (A.23), (A.18) 式代入 (A.16) 式，整理系数后就能得到最后的结果(28)式.

参 考 文 献

[1] 顾世洧，自然，**3** (1980), 9.
[2] И. М. Дыкман, *Ж. Т. Ф.*, **8** (1957), 1731.
[3] 顾世洧，物理学报，**28** (1979), 751.
[4] 顾世洧，内蒙古大学学报(自然科学), (1) (1963), 57.
[5] E. Haga, *Prog. Theor. Phys.*, **11** (1954), 449.

THE ELECTROSTATIC POTENTIAL OF SLOW EXCITON IN A POLAR CRYSTAL

KU SHIH-WEI

(Inner Mongolian University)

ABSTRACT

In this paper, the properties of a slow exciton in a polar crystal are discussed. The previous work of the author is generalized to the case that the electron mass is not equal to the hole mass. A perturbation method developed by Haga is used. In the approxiamation that the interaction of phonons of different wave vector in the recoil effect can be neglected, the wave function in the second order approxiamation is derived, and the electrostatic pontential is also calculated.