

极性晶体的表面或界面极化子

潘 金 声

(中国科学院长春物理研究所)

1981年5月14日收到

提 要

本文用动量和位置的线性组合作为算符, 计算了极性晶体的表面或界面极化子的基态能量. 结果表明, 线性组合算符对于研究极性晶体的表面或界面极化子的性质也是适用的.

一、引 言

近几年, 出现了较多的研究极性晶体表面极化子的性质的文章. 例如, Evans 和 Mills^[1]考虑电子只同极化强度的惯性部分相互作用而首先讨论了表面极化子. 在他们所应用的方法中, 体极化子看作绝热近似中的只同表面声子相互作用的准粒子. 这个近似实际只在表面极化子的基态能量 $E_0^{(s)}$ 大于纵光学声子的能量 $\hbar\omega_0$, 以及体极化子的基态能量 $E_0^{(v)}$ 又大于表面极化子的基态能量时才能满足. 前一条件要求电子-声子相互作用常数 α 较大, 而后一条件又要求 α 较小. 其后, Matsuura^[2]又把电子看作是属于 Tamm 表面带, 由于 Tamm 能级的离化能较大, 所以绝热近似能很好满足. 但在他所应用的相互作用势中, 没有考虑到表面电子与体声子的相互作用的减弱效应^[3]. Берил 和 Полатинов^[4]应用了 Брыксин 和 Фирсов 所得出的表面相互作用势^[5]对弱耦合情况下的表面极化子进行了研究. 无疑 Берил 等人的研究应更接近真实情况.

不久前, Huybrechts 在研究体极化子的问题时^[6], 引进了电子的动量和位置的线性组合作为算符, 计算了在强弱耦合情况下极化子的基态能量. 进而 Tokuda 又在 Huybrechts 工作的基础上, 在其动量算符中引进了另一变分参量^[6], 得出了极化子的有效质量. 所得结果表明, 线性组合算符方法跟研究极化子问题的传统方法一致^[7].

本文将应用线性组合算符方法于表面极化子的问题. 结果表明, 这个方法在处理表面极化子问题上也是适用的.

二、哈密顿量及基态能量

我们应用 Брыксин 和 Фирсов 所得到的荷电粒子跟表面声子和体声子的相互作用势, 并附加一镜像势. 这样, 系统的哈密顿量为

$$H = H_e + H_{op}^{(s)} + H_{op}^{(v)} + H_{int} + U_{ei}, \quad (1)$$

其中 H_e 是电子的动能

$$H_e = \frac{p_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} + \frac{p_z^2}{2m_z^*}. \quad (2)$$

这里 $p_{\parallel}$ 是表示平行于界面或表面的动量分量, p_z 是表示沿 z 方向的动量分量, m^* 为电子的有效质量. $H_{op}^{(s)}$ 和 $H_{op}^{(v)}$ 是表面纵光学声子和体纵光学声子的能量

$$H_{op}^{(s)} = \sum_Q \hbar\omega_s a_Q^{\dagger} a_Q; H_{op}^{(v)} = \sum_q \hbar\omega_0 a_q^{\dagger} a_q. \quad (3)$$

H_{int} 是描写电子同表面纵光学振动和体纵光学振动的相互作用势

$$H_{\text{int}} = \left\{ \sum_Q V_Q^* a_Q^{\dagger} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} e^{-Qz} + \text{c.c.} \right\} + \left\{ \sum_q V_q^* a_q^{\dagger} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} (e^{-iq_z z} - e^{-q_z z}) + \text{c.c.} \right\}, \quad (4)$$

其中

$$|V_Q|^2 = \frac{1}{L^2} \frac{2\pi\alpha_s (\hbar\omega_s)^2}{\beta_s Q} \frac{\epsilon_{\infty 1} \epsilon_0}{(\epsilon_{\infty 1} + 1)^{3/4} (\epsilon_0 + 1)^{5/4}}, \quad (5)$$

$$\beta_s = \left(\frac{2m^* \omega_s}{2\hbar} \right)^{1/2},$$

$$|V_q|^2 = \frac{1}{L^3} \frac{4\pi\alpha (\hbar\omega_0)^2}{q^2 \beta_0}, \quad \beta_0 = \left(\frac{2m^* \omega_0}{\hbar} \right)^{1/2}. \quad (6)$$

这里 L 是材料的一度线度, ϵ_0 为静态介电常数, ϵ_{∞} 为高频介电常数. 在 ϵ_0 和 ϵ_{∞} 上的脚标 1 和 2 是表示界面两边分属晶体 1 和 2 的介电常数. α_s 和 α 是表示同表面声子和体声子的 Fröhlich 相互作用常数,

$$\alpha_s = \frac{e^2 \beta_s}{\hbar \omega_s} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left(\frac{\epsilon_0 + 1}{\epsilon_{\infty 1} + 1} \right), \quad (7)$$

$$\alpha = \frac{e^2 \beta_0}{2\hbar \omega_0} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right). \quad (8)$$

此外,我们还附加考虑一表面镜像势^[8],为

$$U_{ei} = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_{\infty 1} (\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2})}. \quad (9)$$

在上面所有各个表示式中, $\mathbf{r}_{\parallel}$ 表示电子在 x - y 平面的坐标; $\mathbf{Q}$ 和 $\mathbf{q}$ 分别为表面声子和体声子的波矢; $a_Q^{\dagger}$ 和 a_Q 为表面声子的产生算符与湮没算符; $a_q^{\dagger}$ 和 a_q 为体声子的产生算符与湮没算符,它们都遵从玻色子的对易关系; ω_s 和 ω_0 分别为表面纵光学声子与体纵光学声子的频率.

如果把电子的运动形象地分成平行于 x - y 平面的运动和垂直于 x - y 平面(沿 z 方向)的运动,并假定沿 z 方向的运动是慢运动,那么就可以类似于绝热近似方法,在决定沿 x - y 平面的运动状态时把沿 z 方向的运动当成参量,然后再对 z 方向取平均.

引进如下的么正变换:

$$U_1 = \exp \left\{ -iA \sum_Q a_Q^{\dagger} a_Q \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_{\parallel} - iA \sum_q a_q^{\dagger} a_q \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel} \right\}, \quad (10)$$

其中 A 是表征耦合强度的一个参量, $A = 1$ 时为弱耦合情况, $A = 0$ 时为强耦合情况. 同时,也对电子沿 x - y 平面的运动引进线性组合算符

$$p_i = \left(\frac{m_{\parallel}^* \hbar \lambda}{2} \right) (b_i^+ + b_i + p_{0i}),$$

$$r_i = i \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} (b_i - b_i^+). \quad (11)$$

这里 i 代表 x, y 方向, λ 和 p_0 是变分参量. (1) 式在 (10) 式的变换下, 并结合 (11) 式, 变为

$$H_1 = U^{-1} H U = H_1^{(0)} + H_1^{(1)},$$

其中

$$\begin{aligned} H_1^{(0)} = & \left(\frac{\hbar \lambda}{2} \right) \left(\sum_i b_i^+ b_i + 1 \right) + \frac{\hbar \lambda}{4} p_0^2 + \frac{p_z^2}{2m_z^*} + U_{ei} \\ & + \frac{\hbar \lambda}{4} \sum_i (b_i^+ b_i^+ + b_i b_i) + \frac{\hbar \lambda}{2} \sum_i p_{0i} (b_i^+ + b_i) \\ & + \sum_Q \left(\hbar \omega_s + A^2 \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} \right) a_Q^+ a_Q + \sum_q \left(\hbar \omega_0 + A^2 \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} \right) a_q^+ a_q \\ & - A \hbar \left(\frac{\hbar \lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \left\{ \sum_Q \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{Q} a_Q^+ a_Q + \sum_q \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel} a_q^+ a_q \right\} \\ & + \sum_Q \left\{ V_Q^* a_Q^+ \exp \left[-(1-A)^2 \left(\frac{\hbar}{4m_{\parallel}^* \lambda} \right) Q^2 \right] \right. \\ & \times \exp \left[-(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_i Q_i b_i^+ \right] \\ & \times \exp \left[(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_i Q_i b_i \right] + \text{c.c.} \left. \right\} e^{-Q^2} \\ & + \sum_q \left\{ V_q^* a_q^+ \exp \left[-(1-A)^2 \left(\frac{\hbar}{4m_{\parallel}^* \lambda} \right) q_{\parallel}^2 \right] \right. \\ & \times \exp \left[-(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_i q_i b_i^+ \right] \\ & \times \exp \left[(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_i q_i b_i \right] + \text{c.c.} \left. \right\} (e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z}), \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_1^{(1)} = & \hbar^2 A^2 \left\{ \sum_{Q, Q'} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}' a_Q^+ a_Q' a_Q' a_Q + \sum_{q, q'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' a_q^+ a_q' a_q' a_q \right\} \\ & - A \hbar \left(\frac{\hbar \lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \left\{ \sum_Q a_Q^+ a_Q \sum_i Q_i (b_i^+ + b_i) \right. \\ & \left. + \sum_q a_q^+ a_q \sum_i q_i (b_i^+ + b_i) \right\}. \quad (13) \end{aligned}$$

$H_1^{(1)}$ 是描写极化子发射虚声子的反弹能量, 本文不去考虑它. 将 $H_1^{(0)}$ 再作如下的么正变换:

$$U_2 = \exp \left[\sum_Q (a_Q^+ f_Q - a_Q f_Q^*) + \sum_q (a_q^+ f_q - a_q f_q^*) \right], \quad (14)$$

就得

$$\begin{aligned} H_2^{(0)} = & U_2^{-1} H_1^{(0)} U_2 \\ = & \left(\frac{\hbar \lambda}{2} \right) \left(\sum_i b_i^+ b_i + 1 \right) + \frac{\hbar \lambda}{4} p_0^2 + \frac{1}{2m_z^*} p_z^2 + U_{ei} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\hbar\lambda}{4} \sum_j (b_j^\dagger b_j + b_j b_j^\dagger) + \left(\frac{\hbar\lambda}{2}\right) \sum_j p_{0j} (b_j^\dagger + b_j) \\
& + \sum_Q \left(\hbar\omega_s + A^2 \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} \right) (a_Q^\dagger + f_Q^*) (a_Q + f_Q) \\
& + \sum_q \left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} \right) (a_q^\dagger + f_q^*) (a_q + f_q) \\
& - A\hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \sum_Q \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{Q} (a_Q^\dagger + f_Q^*) (a_Q + f_Q) \\
& - A\hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \sum_q \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel} (a_q^\dagger + f_q^*) (a_q + f_q) \\
& + \sum_Q \left\{ V_Q^* (a_Q^\dagger + f_Q^*) \exp \left[-(1-A)^2 \frac{\hbar}{4m_{\parallel}^* \lambda} Q^2 \right] \right. \\
& \times \exp \left[-(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_j Q_j b_j^\dagger \right] \\
& \times \exp \left[(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_j Q_j b_j \right] + \text{c.c.} \left. \right\} e^{-Qz} \\
& + \sum_q \left\{ V_q^* (a_q^\dagger + f_q^*) \exp \left[-(1-A)^2 \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right) q_{\parallel}^2 \right] \right. \\
& \times \exp \left[-(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_j q_j b_j^\dagger \right] \\
& \times \exp \left[(1-A) \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel}^* \lambda} \right)^{1/2} \sum_j q_j b_j \right] + \text{c.c.} \left. \right\} (e^{iq_z z} - e^{-q_z z}). \quad (15)
\end{aligned}$$

(15)式就是我们的系统在零级近似下的哈密顿量的新表示. 在新的表示中, f_Q, f_q, λ, p_0 等变分参量必须对基态能量变分来求得. 我们定义系统的基态由态函数

$$\Phi_0 = |\psi_z 0\rangle$$

描述, 其中 $|0\rangle$ 是声子与极化子的真空态, 它满足

$$b_j |0\rangle = a_j |0\rangle = 0. \quad (16)$$

另一方面, 在使基态能量为极小的变分中, 还应当受到系统的总动量制约. 但我们在开头就已假定, 电子沿 z 方向的运动是慢运动, 因此, 在绝热近似中, 其 z 方向的动量可以当作常数. 在变分中只受平行于 x - y 平面的总动量 $\mathbf{P}_{\parallel T}$ 制约

$$\mathbf{P}_{\parallel T} = \mathbf{p}_{\parallel} + \sum_q \hbar \mathbf{q} a_q^\dagger a_q + \sum_Q \hbar \mathbf{Q} a_Q^\dagger a_Q. \quad (17)$$

根据(10), (11)式以及变换(14)式, 可得

$$\begin{aligned}
& (U_1 U_2)^{-1} \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathbf{P}_{\parallel T} U_1 U_2 = \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathcal{P}_2 \\
& = \left(\frac{m_{\parallel}^* \hbar \lambda}{2} \right)^{1/2} \mathbf{p}_{0\parallel} + \left(\frac{m_{\parallel}^* \hbar \lambda}{2} \right)^{1/2} \sum_j u_j (b_j^\dagger + b_j) \\
& + (1-A) \sum_Q \hbar \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathbf{Q} (a_Q^\dagger + f_Q^*) (a_Q + f_Q) \\
& + (1-A) \sum_q \hbar \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathbf{q}_{\parallel} (a_q^\dagger + f_q^*) (a_q + f_q). \quad (18)
\end{aligned}$$

这里 $u_{\parallel}$ 是 Lagrange 因子. 于是, 由(15)式和(18)式以及条件(16)式, 可得到 $(H_2^{(0)} - \mathbf{u} \cdot \mathcal{P}_2)$ 对基态的平均值

$$\begin{aligned}
 & F(\lambda, p_{0\parallel}, f_Q, f_q \cdots) \\
 &= \langle 0 | H_2^{(0)} - \mathbf{u} \cdot \mathcal{P}_2 | 0 \rangle \\
 &= \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\lambda}{4} p_0^2 + \frac{1}{2m_z} p_z^2 + U_{ei} \\
 &\quad + \sum_Q \left(\hbar\omega_s + A^2 \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} \right) |f_Q|^2 + \sum_q \left(\hbar\omega_0 + A^2 \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\parallel}^*} \right) |f_q|^2 \\
 &\quad - A\hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \left\{ \sum_Q \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{Q} |f_Q|^2 + \sum_q \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel} |f_q|^2 \right\} \\
 &\quad + \sum_Q \left\{ V_Q^* f_Q^* \exp \left[-(1-A)^2 \frac{\hbar}{4m_{\parallel}^* \lambda} Q^2 \right] + \text{c.c.} \right\} e^{-Qz} \\
 &\quad + \sum_q \left\{ V_q^* f_q^* \exp \left[-(1-A)^2 \frac{\hbar}{4m_{\parallel}^* \lambda} q_{\parallel}^2 \right] + \text{c.c.} \right\} (e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z}) \\
 &\quad - \left(\frac{m_{\parallel}^* \hbar \lambda}{2} \right)^{1/2} \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathbf{p}_0 - (1-A) \sum_Q \hbar \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathbf{Q} |f_Q|^2 \\
 &\quad - (1-A) \sum_q \hbar \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathbf{q}_{\parallel} |f_q|^2. \tag{19}
 \end{aligned}$$

下面将看到, 极化子的运动将通过 $u_{\parallel}$ 和 $\mathbf{p}_0$ 的关系自动地体现. 当 $u_{\parallel} \rightarrow 0$ 时, (19) 式便退变到极化子是静止的情况.

将(19)式对 $f_q, f_Q, \mathbf{p}_0, \lambda$ 等变分参量变分, 可决定参量 $f_q, f_Q, \mathbf{p}_0, \lambda \cdots$. 然后, 用所决定的参量可计算基态能量 $\langle 0, \psi_z | H_2^{(0)} | \psi_z, 0 \rangle$ 以及动量平均值 $\langle 0, \psi_z | \mathcal{P}_2 | \psi_z, 0 \rangle$. 然而, 甚至在极化子是静止的情况, 要对任意的 A 值去得到解析表达式也是很困难的. 本文先就 $A=1$ 的情况进行讨论.

当 $A=1$ 时, 将(19)式对 f_Q, f_Q^*, f_q, f_q^* 变分, 得

$$\begin{aligned}
 f_Q &= \frac{-V_Q^* e^{-Qz}}{\hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2M_{\parallel}^*} - \hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{Q}}, \\
 f_Q^* &= \frac{-V_Q e^{-Qz}}{\hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} - \hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{Q}}, \\
 f_q &= \frac{-V_q^* (e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z})}{\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} - \hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel}}, \\
 f_q^* &= \frac{-V_q (e^{-iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z})}{\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} - \hbar \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel}}. \tag{20}
 \end{aligned}$$

将所求得各个 f 值代回(19)式, 并对 $\mathbf{p}_0$ 展开, 保留到 $\mathbf{p}_0$ 的第二级项, 得

$$F(\lambda, \mathbf{p}_0, \mathbf{u}_{\parallel} \cdots)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar\lambda}{2} + \frac{\hbar\lambda}{4} p_0^2 - \left(\frac{m_{\parallel}^* \hbar\lambda}{2} \right)^{1/2} \mathbf{u}_{\parallel} \cdot \mathbf{p}_0 + \frac{p_z^2}{2m_z^*} + U_{ei} \\
&\quad - \sum_{\mathbf{Q}} \frac{|V_Q|^2 e^{-2Qz}}{\left(\hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} \right)} \left\{ 1 + \frac{\hbar^2 \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right) (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{Q})^2}{\left(\hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} \right)^2} + \dots \right\} \\
&\quad - \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_q|^2 |e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z}|^2}{\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} \right)} \left\{ 1 + \frac{\hbar^2 \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}^*} \right) (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel})^2}{\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} \right)^2} + \dots \right\}. \quad (21)
\end{aligned}$$

在得到这一表式的过程中,因包含 $(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{Q})$ 和 $(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel})$ 的项在对 $\mathbf{Q}$ 和 $\mathbf{q}$ 的求和中等于零,故已舍去. 将上式对 $\mathbf{p}_0$ 变分,得

$$\mathbf{p}_0 = \frac{\left(\frac{2m_{\parallel}^*}{\hbar\lambda} \right) \mathbf{u}_{\parallel}}{1 - 2 \frac{\hbar^2}{m_{\parallel}^*} (f_1 + f_2)}, \quad (22)$$

其中

$$f_1 = \sum_{\mathbf{Q}} \frac{|V_Q|^2 Q^2 \left(\frac{\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{Q}}{p_0 Q} \right)^2 \langle \phi_z | e^{-2Qz} | \phi_z \rangle}{\left(\hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} \right)^3}, \quad (23)$$

$$f_2 = \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_q|^2 q_{\parallel}^2 \left(\frac{\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel}}{p_0 q_{\parallel}} \right)^2 \langle \phi_z | e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z} |^2 | \phi_z \rangle}{\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} \right)^3}. \quad (24)$$

在 f_1 和 f_2 中,我们已用 $\langle \phi_z | e^{-2Qz} | \phi_z \rangle$ 代替了 e^{-2Qz} , 用 $\langle \phi_z | e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z} |^2 | \phi_z \rangle$ 代替了 $|e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z}|^2$, 这等价于 (21) 式在对 $\mathbf{p}_0$ 变分前就已对 z 方向取平均. 这样做,其结果跟以后再对 z 方向取平均直至 $\mathbf{p}_0$ 的第二级是等同的. 将所得 $\mathbf{p}_0$ 值代回 (21) 式,可以看到除第一项外,其它各项都与 λ 无关,因此可得

$$\lambda = 0. \quad (25)$$

从所确定的各变分参量,可以求得动量的平均值,为

$$\begin{aligned}
\mathcal{P} &= \langle 0, \phi_z | \mathcal{P}_z | \phi_z, 0 \rangle \\
&= \left(\frac{m_{\parallel}^* \hbar\lambda}{2} \right)^{1/2} \mathbf{P}_0 \\
&= m_{\parallel}^* \left[1 - 2 \frac{\hbar^2}{m_{\parallel}^*} (f_1 + f_2) \right]^{-1} \mathbf{u}_{\parallel}. \quad (26)
\end{aligned}$$

这就表明, $\mathbf{u}_{\parallel}$ 具有极化子平移速度的意义,而

$$M_{\parallel}^* = m_{\parallel}^* \left[1 - 2 \frac{\hbar^2}{m_{\parallel}^*} (f_1 + f_2) \right]^{-1} \quad (27)$$

具有质量的意义,称为极化子的有效质量.

由(15)式以及所得到的各个变分参量表示式(20),(22)和(25),可以得到基态能量表示式

$$\begin{aligned}
 E^{(0)} &= \langle 0, \phi_z | H_2^{(0)} | \phi_z, 0 \rangle \\
 &= \frac{\mathcal{D}^2}{2M_{\parallel}^*} + \left\langle \phi_z \left| \frac{1}{2m_z^*} p_z^2 + U_{ei} \right| \phi_z \right\rangle \\
 &\quad - \sum_q \frac{|V_q|^2 \langle \phi_z | e^{iq_z z} - e^{-q_{\parallel} z} |^2 \phi_z \rangle}{\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} \right)} \\
 &\quad - \sum_Q \frac{|V_Q|^2 \langle \phi_z | e^{-2Qz} | \phi_z \rangle}{\left(\hbar\omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{\parallel}^*} \right)}. \quad (28)
 \end{aligned}$$

三、计算与讨论

根据(28)式,只要波函数 ϕ_z 已知,就可以求出 $E^{(0)}$. 现在我们应用试探性函数

$$|\phi_z\rangle = 2\beta^{3/2} z e^{-\beta z}, \quad (29)$$

代入(28)式,而 β 则从 $E^{(0)}$ 为极值的变分中决定. 经过一定的运算,得到

$$\begin{aligned}
 E^{(0)} &= \frac{\mathcal{D}^2}{2M_{\parallel}^*} + \frac{\hbar^2}{2m_z^*} \beta^2 + \frac{e^2}{4} \frac{\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2}}{\epsilon_{\infty 1}(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2})} - \frac{\pi}{2} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*} \right) \alpha \hbar \omega_0 \\
 &\quad - 2\alpha \hbar \omega_0 \frac{\epsilon_0 \epsilon_{\infty 1}}{(\epsilon_0 + 1)(\epsilon_{\infty 1} + 1)} \frac{u'^2}{\beta_0} \left\langle \phi_z \left| \int \frac{e^{-2Qz}}{u'^2 + Q^2} dQ \right| \phi_z \right\rangle \\
 &\quad + \alpha \hbar \omega_0 \frac{u^2}{\beta_0} \left\langle \phi_z \left| \int \frac{e^{-2q_{\parallel} z}}{u^2 + q_{\parallel}^2} dq_{\parallel} \right| \phi_z \right\rangle.
 \end{aligned}$$

这里已令

$$u' = \left(\frac{2m_{\parallel}^* \omega_s}{\hbar} \right)^{1/2}; \quad u = \left(\frac{2m_{\parallel}^* \omega_0}{\hbar} \right)^{1/2}.$$

上列表示式最后两项形式上完全一样,经过一定的运算(参看附录1),最后得到

$$\begin{aligned}
 E^{(0)} &= \frac{\mathcal{D}^2}{2M_{\parallel}^*} + \frac{\hbar^2}{2m_z^*} \beta^2 - \frac{\pi}{2} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*} \right)^{1/2} \alpha \hbar \omega_0 \\
 &\quad + 2 \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*} \right)^{1/2} \alpha \hbar \omega_0 \left[\frac{\epsilon_0 \epsilon_{\infty 1}}{(\epsilon_0 + 1)(\epsilon_{\infty 1} + 1)} \left(\frac{\omega_0}{\omega_s} \right)^{1/2} - 1 \right] \left(\frac{\beta}{\beta_0} \right)^2 \\
 &\quad - \alpha \hbar \omega_0 \left[\frac{\epsilon_0 \epsilon_{\infty 1}}{(\epsilon_0 + 1)(\epsilon_{\infty 1} + 1)} - \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0(\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2})}{(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty 1})(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2})} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} \right] \frac{\beta}{\beta_0}. \quad (30)
 \end{aligned}$$

令

$$A_1 = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{\infty 1}}{(\epsilon_0 + 1)(\epsilon_{\infty 1} + 1)}, \quad A_2 = \frac{\epsilon_0(\epsilon_{\infty 1} - \epsilon_{\infty 2})}{2(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty 1})(\epsilon_{\infty 1} + \epsilon_{\infty 2})},$$

并将 E^0 表成 $\hbar\omega_0$ 的单位,用 $E_{\omega}^{(0)}$ 表示; β 表成 β_0 的单位,用 β' 表示,(30)式就变为

$$\begin{aligned}
E^{(0)} = & \frac{1}{\hbar\omega_0} \frac{\mathcal{P}^2}{2M_{\parallel}} + \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m_z^*}\right) \beta'^2 - \frac{\pi}{2} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*}\right)^{1/2} \alpha \\
& + 2 \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m_{\parallel}^*}\right)^{1/2} \alpha \left[A_1 \left(\frac{\omega_0}{\omega_s}\right)^{1/2} - \frac{1}{2} \right] \beta'^2 \\
& - \alpha \left[A_1 - A_2 - \frac{1}{2} \right] \beta'.
\end{aligned} \quad (31)$$

将上式对 β' 变分, 可得

$$\beta' = \frac{m_z^*}{2m^*} \left\{ 1 + 2 \frac{\alpha m_z^*}{(m^* m_{\parallel}^*)^{1/2}} \left[A_1 \left(\frac{\omega_0}{\omega_s}\right)^{1/2} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{-1} \left(A_1 - A_2 - \frac{1}{2} \right) \alpha. \quad (32)$$

β' 值具有表面或界面极化子的状态倒半径的意义。显然 β' 不能小于零, 否则就失去了意义。 β' 不能小于零的物理意义是, 表面或界面极化子的形成只有在满足下列条件下才是可能的, 也就是要满足

$$A_1 - A_2 - \frac{1}{2} > 0$$

的条件, 这跟 Берил 等人^[4]所得条件一致。这一条件在 $\varepsilon_{\infty 2} = \varepsilon_{\infty 1}$ 的情况下总是满足的。但在 $\varepsilon_{\infty 2}$ 大于某个最小的 $(\varepsilon_{\infty 2})_{\min}$ 时, 即 $\varepsilon_{\infty 2} > (\varepsilon_{\infty 2})_{\min}$ 时, 它也能在 $\varepsilon_{\infty 2} < \varepsilon_{\infty 1}$ 的情况下满足。这最小的 $(\varepsilon_{\infty 2})_{\min}$ 由下式决定:

$$(\varepsilon_{\infty 2})_{\min} = \frac{\varepsilon_0 - (2A_1 - 1)(\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty 1})}{\varepsilon_0 + (2A_1 - 1)(\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty 1})}. \quad (33)$$

根据这一条件可以得出, 当一个高频介电常数 $\varepsilon_{\infty 1}$ 的晶体跟另一个高频介电常数为 $\varepsilon_{\infty 2}$ 的晶体形成了界面时, 表面或界面极化子总在高频介电常数小的一侧形成。这一结论似乎对层形半导体材料或超晶格半导体是有意义的。

将(32)式代回(31)式, 就得到

$$\begin{aligned}
E^{(0)} = & \frac{1}{\hbar\omega_0} \frac{\mathcal{P}^2}{2M_{\parallel}} - \frac{\pi}{2} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*}\right)^{1/2} \alpha \\
& - \frac{m_z^*}{4m^*} \left\{ 1 + 2 \frac{\alpha m_z^*}{(m^* m_{\parallel}^*)^{1/2}} \left[A_1 \left(\frac{\omega_0}{\omega_s}\right)^{1/2} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{-1} \left(A_1 - A_2 - \frac{1}{2} \right)^2 \alpha^2.
\end{aligned} \quad (34)$$

通常人们定义表面极化子的结合能为表面极化子的基态能量与体极化子的基态能量之差, 而取体极化子的能量为 $\alpha\hbar\omega_0$ 。我们如果取平行于 x - y 平面的动能为零, 则得表面或界面极化子的结合能为

$$\begin{aligned}
\Delta E_{\omega}^{(0)} = & -\frac{m_z^*}{4m^*} \left\{ 1 + 2 \frac{\alpha m_z^*}{(m^* m_{\parallel}^*)^{1/2}} \left[A_1 \left(\frac{\omega_0}{\omega_s}\right)^{1/2} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{-1} \left(A_1 - A_2 - \frac{1}{2} \right)^2 \alpha^2 \\
& - \frac{\pi}{2} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*}\right)^{1/2} \alpha + \alpha.
\end{aligned} \quad (35)$$

这一表示式的意义是, 表面极化子俟满足形成的条件(33)式后, 能量即由体极化子的基态能量下降下来, 其中一部分为

$$\Delta E_{\omega}^{(0)} = - \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*}\right)^{1/2} - 1 \right] \alpha; \quad (36)$$

另一部分为

$$\Delta E_{\omega_2}^{(0)} = -\frac{m_z^*}{4m^*} \left\{ 1 + 2 \frac{\alpha m_z^*}{(m^* m_{||}^*)^{1/2}} \left[A_1 \left(\frac{\omega_0}{\omega_s} \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \right] \right\}^{-1} \left(A_1 - A_2 - \frac{1}{2} \right)^2 \alpha^2. \quad (37)$$

这后一部分能量就是表面或界面极化子相对于表面或界面极化子为零的状态的形成能,它是真由电子与表面纵光学声子的相互作用以及电子与体纵光学声子的相互作用的减弱效应所引起. 表 1 列出了介电常数为 ϵ_0 和 $\epsilon_{\infty 1}$ 的晶体与某一介电常数为 $\epsilon_{\infty 2}$ 的另一晶体形成界面(或结)后,在界面附近的极化子的结合能和状态的倒半径的计算值.

下面我们再看看极化子的有效质量,分极化子强烈局域于表面的情况(即 $z \rightarrow 0$ 的情况),以及在界面附近伸展到一定区域的情况. 根据 (27) 式以及 f_1 和 f_2 的表示式 (23) 和 (24),如果极化子强烈地局域于表面,则有

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\hbar^2}{m_{||}^*} (f_1 + f_2) \\ & \xrightarrow{z \rightarrow 0} 2 \frac{\hbar^2}{m_{||}^*} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2 q_{||}^2 (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{||} / p_0 q_{||})^2}{\left(\hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{||}^2}{2m_{||}^*} \right)^3} \\ & \quad + 2 \frac{\hbar^2}{m_{||}^*} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{|V_{\mathbf{Q}}|^2 Q^2 (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{Q} / p_0 Q)^2}{\left(\hbar \omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{||}^*} \right)^3} \\ & \quad - \frac{\hbar^2}{m_{||}^*} \sum_{\mathbf{q}_{||}} \frac{|V_{\mathbf{q}_{||}}|^2 q_{||}^2 (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{||} / p_0 q_{||})^2}{\left(\hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{||}^2}{2m_{||}^*} \right)^3} \\ & = \frac{\pi}{4} \left(\frac{m_{||}^*}{m^*} \right)^{1/2} A_1 \left(\frac{\omega_0}{\omega_s} \right)^{1/2} \alpha. \end{aligned}$$

这个表示式中的 $|V_{\mathbf{q}_{||}}|^2$ 为

$$|V_{\mathbf{q}_{||}}|^2 = \frac{4\pi\alpha(\hbar\omega_s)^2}{L^2 q_{||} \beta_0}.$$

所以当极化子强烈局域于表面的情况下,其有效质量为

$$M_{||}^* \xrightarrow{z \rightarrow 0} m_{||}^* \left[1 - \frac{\pi}{4} \left(\frac{m_{||}^*}{m^*} \right)^{1/2} A \left(\frac{\omega_0}{\omega_s} \right)^{1/2} \alpha \right]^{-1}. \quad (38)$$

事实上,极化子是在表面或界面附近一定的范围. 正如(32)式所表明的,在 z 方向伸展的范围,对实际上碰到的大多数晶体材料来说,其数量级是十几个到几十个玻尔半径. 所以,对于这种情况,则有(参看附录 2)

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\hbar^2}{m_{||}^*} (f_1 + f_2) \\ & = 2 \frac{\hbar^2}{m_{||}^*} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}|^2 q_{||}^2 (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{||} / p_0 q_{||})^2}{\left(\hbar \omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{||}^2}{2m_{||}^*} \right)^3} \\ & \quad + 2 \frac{\hbar^2}{m_{||}^*} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{|V_{\mathbf{Q}}|^2 Q^2 (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{Q} / p_0 Q)^2 \langle \phi_z | e^{-2Qz} | \phi_z \rangle}{\left(\hbar \omega_s + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m_{||}^*} \right)^3} \end{aligned}$$

表 1 表面或界面极化子的有效质量 $M_{\parallel}^*$ 与结合能 $\Delta E_{\omega}^{(0)}$ 的计算值

物 质	$\alpha^{(1)}$	$\hbar\omega_0$ (meV)	ε_0	$\varepsilon_{\infty 1}$	$\varepsilon_{\infty 2}$	$M_{\parallel}^{(2)}$ ($m_{\parallel}^*$)	$-\Delta E_{\omega}^{(0)}(\hbar\omega_0)$		$-\Delta E_{\omega}^{(4)}$ ($\hbar\omega_0$)	$\beta' = \frac{\beta}{\beta_0}$	$\beta'^{(4)}$
							$-\Delta E_{\omega 1}^{(0)}$	$-\Delta E_{\omega 2}^{(0)}$			
TiCl	4.28	21.5	37.6	5.10	7	无意义		0.0798	0.0428	0.1341	0.137
					∞		2 4430	0.1949			
								0.9149			
GaAs	0.27	36.75	12.83	10.9	10	1.119		0.0006	0.0007	0.0235	0.025
					12		0.1541	0.0040			
					∞			0.2068			
CdS	1.35	37.83	8.42	5.27	4	2.128		0.0012	0.0014	0.0269	0.0275
					7		0.7706	0.0514			
					∞			0.6714			
CdSe	1.27	27	9.3	6.1	5	1.995		0.0042		0.0485	
					8		0.7248	0.0505			
					∞			0.6987			
ZnS	1.39	43.67	8.77	5.2	4	2.005		0.0033		0.0370	
					7		0.7924	0.0533			
					∞			0.6101			
ZnSe	1.25	31	9.1	5.9	5	1.832		0.0054		0.0562	
					7		0.7135	0.0352			
					∞			0.7135			
ZnO	1.74	73.27	8.15	4.00	3	3.158		0.0022		0.0335	
					5		0.9932	0.0438			
					∞			0.5975			

1) 这里是取电子的质量为自由电子质量 m_0 计算的。

2) 在计算 $M_{\parallel}^*$ 和 $\Delta E_{\omega}^{(0)}$ 时已取 $m_{\parallel}^* = m_z^* = m^*$, m^* 为电子的有效质量。

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{m_{\parallel}^*} \sum_{q_{\parallel}} \frac{|V_{q_{\parallel}}|^2 q_{\parallel}^2 (\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{q}_{\parallel} / p_0 q_{\parallel})^2 \langle \phi_z | e^{-2q_{\parallel} z} | \phi_z \rangle}{\left(\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 q_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*} \right)^3} \\
 & \approx \frac{\pi}{8} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*} \right)^{1/2} \alpha - \frac{3}{4} \alpha \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*} \right)^{1/2} \beta'^2 \left[A_1 \left(\frac{\omega_0}{\omega_s} \right)^{3/2} - \frac{1}{2} \right] \\
 & \sim \frac{\pi}{8} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*} \right)^{1/2} \alpha.
 \end{aligned}$$

其有效质量为

$$M_{\parallel}^* = m_{\parallel}^* \left[1 - \frac{\pi}{8} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m^*} \right)^{1/2} \alpha \right]^{-1}. \quad (39)$$

显然,在这种情况下, α 必须满足

$$\alpha < \frac{8}{\pi} \left(\frac{m^*}{m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \sim 2.5 \quad (40)$$

的条件,否则有效质量就失去了意义。或者根据(38)式, α 必须满足

$$\alpha < \frac{4}{\pi} \left(\frac{m^*}{m_{\parallel}^*} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega_s}{\omega_0} \right)^{1/2} \frac{1}{A_1} \sim 1.5-2.0. \quad (41)$$

这两个条件基本上一致. 不过后一条件对 α 要求更苛一些, 而且强烈地依赖于晶体的介电常数. 平常我们所指弱相互作用就是指 α 较小的情况, 但到底怎样的 α 值算是小的, 没有标准, 所以我们不妨就取 (41) 式作为判断 α 是小的判据. 表 1 中也一并列出了根据 (39) 式计算的有效质量. 为了便于对比, 在表 1 中也相应地列出了其他作者用其它方法所得的结果. 表 1 中没有实验值, 因为关于表面或界面极化子的结合能和有效质量的实验值, 目前很少报道, 因此只能限于理论探讨. 从我们的结果表明, 本文所发展的方法对于表面或界面极化子的问题是适用的.

根据上面的讨论可以得出, 表面或界面极化子的结合能强烈地依赖于晶体的介电常数 ϵ_0 , $\epsilon_{\infty 1}$ 和 $\epsilon_{\infty 2}$ 以及相互作用常数 α . 它的形成要受结两边的材料制约, 形成的条件由 (33) 式决定. 显然, 如果晶体的外侧是真空状态, 即 $\epsilon_{\infty 2} \rightarrow 0$, 那末这时的表面是没有极化子的. 表面极化子同体极化子相比, 除 TiCl 外, 都具有较小的结合能和大的状态半径. 对于 TiCl 说来, 由于其相互作用常数较大, 表现其结合能也较大, 但其有效质量就失去了意义. 预料对于这种材料, 应用 $A = 0$ 或 $A < 1$ 的理论会更适宜些. 对于像 GaAs 这样的 III-V 族材料, 其 α 较小, 预料 $A = 1$ 的理论最为适宜. 对于像 ZnS 等这样的 II-VI 族材料, 其 α 值都接近于 (40) 式所规定的标准, 所以预料对于这些材料其计算误差可能要大于 III-V 族材料. 此外, 作为弱耦合情况下表面极化子的运动同体极化子相比是缓慢的条件, 即 $\Delta E_{\omega_2}^{(0)} < \alpha \hbar \omega_0$, 以及点阵振动相比是缓慢的条件, 即 $\Delta E_{\omega_2}^{(0)} < \hbar \omega_0$, 在所有实例中都能很好地满足. 对于 TiCl 说来, 这一条件虽然也能满足, 但由于其相互作用常数较大, 所计算的能值 E 和 β' 值并不一定是反映真实情况.

深切感谢徐叙瑭教授对本工作的关心与支持.

附 录

1. 在基态能量 $E^{(0)}$ 的表示式中, 如下形式积分的化简:

$$\left\langle \psi_z \left| \int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ \right| \psi_z \right\rangle.$$

将 z 分量的尝试性函数 (29) 式代入上式, 得

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_z \left| \int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ \right| \psi_z \right\rangle \\ &= \frac{4\beta^3}{u} \int z^2 e^{-2\beta z} dz [\text{Ci}(2zu) \sin(2zu) - \text{Si}(2zu) \cos(2zu)]. \end{aligned}$$

这里 $\text{Ci}(2zu)$ 和 $\text{Si}(2zu)$ 分别为

$$\text{Ci}(2zu) = - \int_u^\infty \frac{\cos(2xu)}{x} dx,$$

$$\text{Si}(2zu) = - \int_u^\infty \frac{\sin(2xu)}{x} dx.$$

经过简单的运算, 得

$$\left\langle \psi_z \left| \int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ \right| \psi_z \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4\beta^3}{u} \int_u^\infty \int_0^\infty \frac{\sin[2(x-u)z]}{x} x^2 e^{-2\beta z} dz dx \\
&= \frac{\beta^3}{u} \int_u^\infty \frac{(x-u)[3\beta^2 - (x-u)^2]}{x[\beta^2 + (x-u)^2]^3} dx \\
&= \frac{\beta^3}{u} \left\{ \int_0^\infty \frac{3\beta^2 - y^2}{\beta^2 + y^2} dy - u \int_u^\infty \frac{3\beta^2 - (x-u)^2}{x[\beta^2 + (x-u)^2]^3} dx \right\} \\
&\doteq \frac{1}{u} \left[\frac{\beta}{2u} + \frac{\beta^3}{u^3} \ln \frac{\beta}{u} + \frac{3}{2} \frac{\beta^3}{u^3} \right] \\
&\doteq \frac{1}{u} \left[\frac{\beta}{2u} - \frac{\beta^2}{u^2} \right].
\end{aligned} \tag{A.1}$$

2. 在计算有效质量 M^* 时, 有如下形式的积分:

$$f_1 = \sum_Q \frac{|V_Q|^2 Q^2 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{Q}/P_0 Q)^2 \langle \psi_z | e^{-2Qz} | \psi_z \rangle}{\left(\hbar \omega_z + \frac{\hbar^2 Q^2}{2m^*} \right)^3}.$$

用尝试性函数(29)式代入上式, 经过简单的运算, 得

$$\begin{aligned}
f_1 &= 2\alpha \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{\infty 1}}{(\varepsilon_0 + 1)(\varepsilon_{\infty 1} + 1)} \frac{u^4}{\beta_0} \langle \psi_z | \int_0^\infty \frac{Q^2 e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ | \psi_z \rangle \\
&= 2\alpha \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{\infty 1}}{(\varepsilon_0 + 1)(\varepsilon_{\infty 1} + 1)} \frac{u^4}{\beta_0} \langle \psi_z | \left\{ \frac{z}{4u^2} \int_0^\infty \frac{Q e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ - \frac{z^2}{2u^2} \int_0^\infty e^{-2Qz} dQ \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{8u^2} \int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ + \frac{z^2}{2} \int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ \right\} | \psi_z \rangle \\
&= 2\alpha \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{\infty 1}}{(\varepsilon_0 + 1)(\varepsilon_{\infty 1} + 1)} \frac{u^4}{\beta_0} \left\{ \frac{\beta^3}{u^2} \int_0^\infty x^3 e^{-2\beta z} dz \int \frac{Q e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ \right. \\
&\quad \left. + \frac{\beta^3}{2u^2} \int_0^\infty x^2 e^{-2\beta z} \int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ - \frac{\beta^3}{u^2} \int_0^\infty x^3 e^{-2\beta z} dz \right. \\
&\quad \left. + 2\beta^3 \int_0^\infty x^4 e^{-2\beta z} dz \int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ \right\}.
\end{aligned} \tag{A.2}$$

因

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \frac{Q e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ &= -\text{Ci}(2zu) \cos(2zu) - \text{Si}(2zu) \sin(2zu), \\
\int_0^\infty \frac{e^{-2Qz}}{u^2 + Q^2} dQ &= \frac{1}{u} \{ \text{Ci}(2zu) \sin(2zu) - \text{Si}(2zu) \cos(2zu) \},
\end{aligned}$$

将上两式代入 (A.2) 式, 并且应用下列关系:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty x^{r-1} e^{-2\beta z} \sin[2z(x-u)] dz \\
&= \frac{\Gamma(r)}{[4\beta^2 + 4(x-u)^2]^{r/2}} \sin \left[r \arctg \frac{x-u}{\beta} \right] \\
&\int_0^\infty x^{r-1} e^{-2\beta z} \cos[2z(x-u)] dz \\
&= \frac{\Gamma(r)}{[4\beta^2 + 4(x-u)^2]^{r/2}} \cos \left[r \arctg \frac{x-u}{\beta} \right],
\end{aligned}$$

经过简单的运算与整理, 并在最终表示式中也考虑到 β/u 是小于 1 的, 所以忽略 $(\beta/u)^3$ 以上的项, 最后得到

$$f_1 \doteq 2\alpha \left(\frac{m^*}{\hbar^2} \right) \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{\infty 1}}{(\varepsilon_0 + 1)(\varepsilon_{\infty 1} + 1)} \left(\frac{m^*}{m} \right)^{1/2} \left(\frac{\omega_0}{\omega_z} \right)^{1/2} \frac{45\pi}{128} \frac{u}{\beta_0} + o \left(\frac{\beta^3}{u^3} \right). \tag{A.3}$$

参 考 文 献

- [1] E. Evans and D. Mills, *Sol. Stat. Comm.*, **11**(1972), 1093.
- [2] M. Matsuura, *J. Phys. Soc. Japan*, **41**(1976), 394.
- [3] В. В. Брыксин и Ю. А. Фирсов, *Ф. Т. Т.* **13**, (1971), 496.
- [4] С. И. Берил, Е. П. Показилов *Ф. Т. Т.* **20** (1978), 2386.
- [5] W. J. Huybrechts, *J. Phys. C: Sol. Stat. Phys.*, **10**(1977), 3762.

- [6] N. Tokuda, *J. Phys. C: Sol. Stat. Phys.*, **13**(1980), L851.
[7] T. D. Lee (李政道), F. Low, Pines, *Phys. Rev.*, **90**(1953), 297; R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **127**(1962), 1004.
[8] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, глава 1, Москва (1965).

THE SURFACE OR INTERFACE WEAK COUPLING POLARON IN POLAR CRYSTALS

PAN JIN-SHENG

(*Changchun Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

In this paper, we show that a simple variational method proposed by Huybrechts is also valid for the surface or interface weak coupling polaron in polar crystals. The mass change and the binding energy of the surface polaron, which are given by expressions (27) and (35) in the text respectively, are dependent on the dielectric constant ϵ_0 , $\epsilon_{\infty 1}$, $\epsilon_{\infty 2}$ and the Fröhlich coupling constant α . It is shown that the surface polaron, as compared to bulk polaron, have small binding energy and large state radius.