

研究激子-声子相互作用问题的 积分算符方法

郑 杭 方俊鑫

(上海交通大学应用物理系)

1985年7月27日收到

提 要

本文以激子与极性声子的相互作用问题为例,提出采用积分算符方法来讨论激子-声子相互作用的动力学问题。这种方法与以前许多作者讨论该问题时采用的方法不同。本方法的特点是:除了能得到与实验测定值符合得较好的结合能数据外,还可以同时得到激子寿命,质心质量重整因子,以及这些量随温度的变化关系。该方法既适用于讨论 $1s$ 态激子,也适用于高于 $1s$ 的态;并且该方法还可较方便地推广到各向异性和简并价带情形。

一、引 言

自从 Haken 关于极性半导体中激子-声子相互作用的开创性研究^[1]发表以来,有关这个问题的理论与实验方面的研究已相当多^[2-11]。见于文献中的研究 Wannier 激子与极性声子相互作用系统的理论方法主要有:微扰法^[5],变分法^[6-10],格林函数技术^[2,3]等等。这些方法在计算激子的结合能时都获得了相当的成功,但它们仍有不足之处。(1)实际极性半导体大多在 Γ 点有简并价带结构,有些还是各向异性的;而上述方法大多是针对各向同性非简并价带模型的,近年来出现的讨论各向异性^[6]或简并价带^[10]的工作仍需用球对称近似等条件。(2)Wannier 激子与极性声子相互作用系统可区分两种不同的物理情况:一是电子与空穴极化子的半径之和小于激子半径,即大半径激子,这时 Haken 的有效相互作用势^[1]的物理图象比较清楚;二是电子与空穴极化子的半径之和大于激子半径,即小半径激子,这时粒子-声子相互作用和库仑吸引作用这两类相互作用过程间的干涉不容忽视。上述方法都对 Haken 有效势作了改进。文献[2]用的是一种内推办法,但文献[3]指出文献[2]的方法是有问题的;[5-8,10]大体上都是在有效势中引入某种变分参量或变分函数,这样的有效势的物理意义不很明确。(3)理论应该能够解释有限温度的效应,如谱线位置和线形随温度的变化;但是,在计算结合能时比较成功的变分法并不适合于讨论此类问题。

最近,文献[11]中提出用运动方程方法来讨论激子-声子相互作用系统,但他们仍限于各向同性非简并价带模型,也没有讨论激子寿命和质心质量重整等重要问题。并且,他们在运动方程的求解中还近似略去了相当重要而不应忽略的项。

本文以激子与极性声子的相互作用问题为例,提出引入一个积分算符可以比文献

[11] 更完整地解出运动方程; 然后用 Rayleigh-Schrödinger 微扰法而不是变分法来解 Bethe-Salpeter 方程, 得到激子的自能、寿命、质心质量重整因子等物理量及它们与温度的变化关系. 为了比较简明地说明方法, 本文中以各向同性非简并价带模型进行讨论, 推广到各向异性和简并价带的情形将另文讨论.

二、哈密顿量和 Bethe-Salpeter 方程

$$H = H_0 + H_{e-h} + H_{e-ph} + H_{h-ph}^{[11]}, \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E^c(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} E^v(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}\sigma}^+ d_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_0 b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}^{[11]}, \quad (2)$$

$c_{\mathbf{k}\sigma}^+$, $d_{\mathbf{k}\sigma}^+$, $b_{\mathbf{q}}^+$ 分别为电子、空穴、极性声子的产生算符,

$$H_{e-h} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} \sum_{\sigma\sigma'} V(\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ d_{\mathbf{k}',\sigma'}^+ d_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty q^2}^{[11]}, \quad (3)$$

ϵ_∞ 为高频介电常数. 因为交换作用与粒子-声子作用的互相影响可以忽略^[10], 所以(3)式中未包括交换作用.

$$\begin{aligned} H_{e-ph} &= \frac{ie}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma} (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^+), \\ H_{h-ph} &= -\frac{ie}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} v_{\mathbf{q}} \sum_{\sigma} d_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}^+ d_{\mathbf{k},\sigma} (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^+), \\ v_{\mathbf{q}} &= \sqrt{2\pi\hbar\omega_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{1}{q}^{[11]}. \end{aligned} \quad (4)$$

电偶极活性的激发态必是自旋单态, 以下不再明显写出自旋指标. 为明确起见, 设

$$E^c(\mathbf{k}) = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2, \quad E^v(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_h} k^2^{[11]}.$$

定义对算符 $S_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = d_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, 在 RPA 退耦和低激发浓度近似^[11]下可以得 Heisenberg 运动方程

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} S_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) &= (E^c(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + E^v(\mathbf{k})) S_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') S_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}') \\ &\quad + \frac{ie}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} \{ S_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}(\mathbf{k}) (b_{\mathbf{p}} - b_{-\mathbf{p}}^+) - S_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}(\mathbf{k}+\mathbf{p}) (b_{\mathbf{p}} - b_{-\mathbf{p}}^+) \}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} [S_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}(\mathbf{k}_1) (b_{\mathbf{p}} \pm b_{-\mathbf{p}}^+)] &= (E^c(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} - \mathbf{p}) + E^v(\mathbf{k}_1)) S_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}(\mathbf{k}_1) (b_{\mathbf{p}} \pm b_{-\mathbf{p}}^+) \\ &\quad + \hbar\omega_0 S_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}(\mathbf{k}_1) (b_{\mathbf{p}} \pm b_{-\mathbf{p}}^+) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}-\mathbf{k}') S_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}(\mathbf{k}') (b_{\mathbf{p}} \pm b_{-\mathbf{p}}^+) \\ &\quad - \frac{ie}{\sqrt{V}} v_{\mathbf{p}} (N_+(\omega_0) \mp N_-(\omega_0)) [S_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}_1) - S_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{p})], \end{aligned} \quad (6)$$

$$N_{\pm}(\omega_0) = n(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2},$$

$n(\omega_0)$ 为 Bose 函数. (6)式表明我们只计入了单声子散射^[12]. 在上述近似下, (5)和(6)式决定了粒子-声子相互作用系统的动力学行为. 引入激子算符

$$S_q = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \varphi_q(\mathbf{k}) S_q(\mathbf{k}), \quad i\hbar \frac{d}{dt} S_q = [S_q, H] = E(q) S_q, \quad (7)$$

$E(q)$ 为激子能量, $\varphi_q(\mathbf{k})$ 为激子波函数的 Fourier 变换. 对相干激子态, 各算符函数的时间变化行为都是 $\exp[-iE(q)t/\hbar]$ ^[11]. 由(6)式得

$$\begin{aligned} & E(q)[S_{q-p}(\mathbf{k}_1)(b_p + b_p^\dagger) \pm S_{q-p}(\mathbf{k}_1)(b_p - b_p^\dagger)] \\ &= (E^c(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} - \mathbf{p}) + E^v(\mathbf{k}_1) \pm \hbar\omega_0)[S_{q-p}(\mathbf{k}_1)(b_p + b_p^\dagger) \pm S_{q-p}(\mathbf{k}_1)(b_p - b_p^\dagger)] \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') [S_{q-p}(\mathbf{k}') (b_p + b_p^\dagger) \pm S_{q-p}(\mathbf{k}') (b_p - b_p^\dagger)] \\ &\mp \frac{2ie}{\sqrt{V}} v_p N_\pm(\omega_0) [S_q(\mathbf{k}_1) - S_q(\mathbf{k}_1 - \mathbf{p})]. \end{aligned} \quad (8)$$

文献[11]中此时略去(8)式右端第二项, 理由是该项代入(5)式后得到声子-电子-电子-空穴-空穴-声子的三阶项. 本文认为, 至少对小半径激子该项不能轻易略去. 如在(8)式中略去此项, 则代入(5)式后可发现这时粒子-声子相互作用与电子-空穴库仑作用是互不相干的过程, 问题简化为电子和空穴极化子之间通过重整化的库仑作用相联系. 但对小半径激子, 此种简化太粗糙, 必须考虑粒子-声子相互作用和库仑作用间的干涉^[2,11]. 本文引入对称核积分算符 U 来计入这种干涉.

$$U(q, p)[\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2] = (2\pi)^3 (E^c(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} - \mathbf{p}) + E^v(\mathbf{k}_1) - E_g) \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \quad (9)$$

$\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{p}$ 为积分算符的参量. (8)式的解可形式地写作^[13]

$$\begin{aligned} & S_{q-p}(\mathbf{k}_1)(b_p - b_p^\dagger) \\ &= -\frac{ie}{\sqrt{V}} v_p \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_2} \{N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U(\mathbf{q}, \mathbf{p}))^{-1}[\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2] \\ &+ N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) + \hbar\omega_0)1 - U(\mathbf{q}, \mathbf{p}))^{-1}[\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2]\} [S_q(\mathbf{k}_2) - S_q(\mathbf{k}_2 - \mathbf{p})], \end{aligned} \quad (10)$$

$\varepsilon(\mathbf{q}) = E(\mathbf{q}) - E_g$, 1 为单位算子. 将(10)式代入(5)式, 采用与文献[11]相同的办法, 利用算符函数的独立性及 U 具有对称核的性质得

$$\begin{aligned} & \varepsilon(\mathbf{q})\varphi_q(\mathbf{k}) = (E^c(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E^v(\mathbf{k}) - E_g)\varphi_q(\mathbf{k}) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\varphi_q(\mathbf{k}') \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} v_p^2 \{N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}'] + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) \\ &+ \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}']\} \varphi_q(\mathbf{k}') + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} v_p^2 \{N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k} \\ &+ \mathbf{p}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}] + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) + \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}]\} \varphi_q(\mathbf{k}') \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} v_p^2 \{N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}] + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) \\ &+ \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}]\} \varphi_q(\mathbf{k}') - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} v_p^2 \{N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 \\ &- U)^{-1}[\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}'] + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) + \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}']\} \varphi_q(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (11)$$

$U(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ 简写作 U . (11) 式是关于波函数 $\varphi_q(\mathbf{k})$ 的 Bethe-Salpeter 方程^[11].

三、Rayleigh-Schrödinger 微扰解

B-S 方程(11)的有效哈密顿量与温度有关,分作两部分

$$H_{\text{eff}}(T) = H_{\text{eff}}^0 + H_{\text{eff}}'(T), \quad (12)$$

$$H_{\text{eff}}^0(\varphi_{\mathbf{q}}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ (2\pi)^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m_{\text{e}}} (\mathbf{k}' + \mathbf{q})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\text{h}}} \mathbf{k}'^2 \right) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right\} \cdot \varphi_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}'). \quad (13)$$

容易看出 H_{eff}^0 的本征解是类氢原子解, 1s 态满足

$$H_{\text{eff}}^0 |\varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}\rangle = \varepsilon_{\text{1s}}^0(\mathbf{q}) |\varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}\rangle, \quad \varepsilon_{\text{1s}}^0(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 - \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \varepsilon_{\infty}^2}, \quad (14)$$

$$\varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}) = 8(\pi a_0^3)^{\frac{1}{2}} \left/ \left[1 + a_0^2 \left(\mathbf{k} + \frac{m_{\text{h}}}{m} \mathbf{q} \right)^2 \right]^2 \right., \quad a_0 = \frac{\hbar^2 \varepsilon_{\infty}}{\mu e^2}, \quad (15)$$

$m = m_{\text{e}} + m_{\text{h}}, \mu = m_{\text{e}} m_{\text{h}} / m$. 本节中将只求 $H_{\text{eff}}'(T)$ 的一级微扰贡献, 并采用 Rayleigh-Schrödinger 微扰法^[12]; 原因是文献[12]中曾指出, 对极化子问题, 只计入单声子散射过程时 Rayleigh-Schrödinger 微扰法的结果比 Brillouin-Wigner 微扰法的结果好. 本文认为, 对激子问题也应有相似情况. 由(11)式易得 $H_{\text{eff}}'(T)$ 的一级微扰为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{1s}}^{(1)}(\mathbf{q}) = & \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}}^2 \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}) \{ [N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}'] \\ & + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) + \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}']] \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}') + [N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) \\ & - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}] + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) + \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k} \\ & + \mathbf{p}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}]] \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}') - [N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}'] \\ & + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) + \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}]] \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}') - [N_+(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 \\ & - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}] + N_-(\omega_0)((\varepsilon(\mathbf{q}) + \hbar\omega_0)1 - U)^{-1}[\mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}]] \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}') \}. \quad (16) \end{aligned}$$

由文献[13], 逆算符 $(1 - U(\mathbf{q}, \mathbf{p})/(\varepsilon(\mathbf{q}) \pm \hbar\omega_0))^{-1}$ 应以迭代方式展开. 在(16)式中展开逆算符的具体步骤较繁琐, 因此将它放在附录中. 由附录的(A.7)和(A.9)式可解出(16)式应为

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{1s}}^{(1)}(\mathbf{q}) = & \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}}^2 \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}'}(\mathbf{k}) \left\{ N_+(\omega_0) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{e}}} p^2 - \hbar\omega_0 \right)^{-1} + N_-(\omega_0) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{e}}} p^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \hbar\omega_0 \right)^{-1} \right\} \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}'}(\mathbf{k}) + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}}^2 \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k})' \left\{ N_+(\omega_0) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{h}}} p^2 - \hbar\omega_0 \right)^{-1} \right. \\ & \left. + N_-(\omega_0) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{h}}} p^2 + \hbar\omega_0 \right)^{-1} \right\} \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}}^2 \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}'}(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \left\{ N_+(\omega_0) \right. \\ & \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{e}}} p^2 - \hbar\omega_0 \right)^{-1} + N_-(\omega_0) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{e}}} + \hbar\omega_0 \right)^{-1} \left\} \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}'}(\mathbf{k}) - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^2}{V} \sum_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}}^2 \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k} \right. \\ & \left. + \mathbf{p}) \left\{ N_+(\omega_0) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{h}}} p^2 - \hbar\omega_0 \right)^{-1} + N_-(\omega_0) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{h}}} + \hbar\omega_0 \right)^{-1} \right\} \varphi_{\mathbf{q}}^{\text{1s}}(\mathbf{k}). \quad (17) \end{aligned}$$

得到(17)式时已采用 Rayleigh-Schrödinger 微扰法的基本步骤, 令 $\varepsilon(\mathbf{q}) = \varepsilon_{\text{1s}}^0(\mathbf{q})$. (17)式中的积分可以通过适当方法得出, 如采用留数定理, 因为相当繁复, 此处不给出具体步骤,

结果为

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(\mathbf{q})] = & -(\alpha_e + \alpha_h)\hbar\omega_0 \cdot N_+(\omega_0) + \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) N_+(\omega_0) \{ 2 - (1 + \gamma_e)^{-2} \\ & - (1 + \gamma_h)^{-2} \} - \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) N_-(\omega_0) \{ 2 - (1 - \gamma_e^2)(1 + \gamma_e^2)^{-2} \\ & - (1 - \gamma_h^2)(1 + \gamma_h^2)^{-2} \} - \frac{e^2}{12a_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) N_+(\omega_0) \left\{ \frac{m_e^2}{m^2} [1 - (1 + \gamma_e)^{-4}] \right. \\ & + \frac{m_h^2}{m^2} [1 - (1 + \gamma_h)^{-4}] \left. \right\} a_0^2 q^2 + \frac{e^2}{12a_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) N_-(\omega_0) \left\{ \frac{m_e^2}{m^2} [1 - (1 - 6\gamma_e^2 \right. \\ & + \gamma_e^4)(1 + \gamma_e^2)^{-4}] + \frac{m_h^2}{m^2} [1 - (1 - 6\gamma_h^2 + \gamma_h^4)(1 + \gamma_h^2)^{-4}] \left. \right\} a_0^2 q^2, \end{aligned} \quad (18)$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha_e &= \frac{e^2}{2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^3\omega_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right), \quad \alpha_h = \frac{e^2}{2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^3\omega_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right), \\ \gamma_e &= \frac{a_0}{2} \left(\frac{2m_e\omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \gamma_h = \frac{a_0}{2} \left(\frac{2m_h\omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (19)$$

(18)式中只求到 q^2 的一级, 因为在光频段有兴趣的是 q^2 较小的情形. (18)式中与 q^2 有关的项表示激子-声子相互作用对激子质心平移质量的重整, 这种重整化与温度有关.

较仔细地考察一下 $q^2 = 0$, $T = 0$ 时的(18)式,

$$\operatorname{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)]_{T=0} = -(\alpha_e + \alpha_h)\hbar\omega_0 + \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) [2 - (1 + \gamma_e)^{-2} - (1 + \gamma_h)^{-2}]. \quad (20)$$

形式地令 $a_0 \rightarrow \infty$ ^[11], 则

$$\operatorname{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)]_{T=0} \xrightarrow{a_0 \rightarrow \infty} -(\alpha_e + \alpha_h)\hbar\omega_0. \quad (21)$$

这正是文献[12]中采用 Rayleigh-Schrödinger 微扰法得到的 $T = 0$ 时电子和空穴极化子自能之和. 由于 $a_0 \rightarrow \infty$ 相当于电子和空穴作非相干运动, 因此得到(21)式是预料中的. 但由此并不说明当电子和空穴在库仑吸引作用下作相干运动时, 它们的极化子类型的自能改正之和仍为 $-(\alpha_e + \alpha_h)\hbar\omega_0$, 原因是: 当 $\gamma_e < 1$ 和 $\gamma_h < 1$ 时(除 III—V 族外, 其它极性半导体大多满足 $\gamma_e < 1$ 和 $\gamma_h < 1$), 展开(20)式右端第二项的分式:

$$\operatorname{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)]_{T=0} = O(\gamma_e^2) + O(\gamma_h^2), \quad (22)$$

不存在 γ_e 和 γ_h 的零阶或一阶项. 这说明至少对半径较小的激子(γ_e 和 γ_h 较小相应于 a_0 较小), 激子的极化子类型自能改正和电子与空穴极化子自能之和有较大的不同. 从物理直观来看应该如此, 因为半径较小时电子与空穴趋向于形成电中性体, 它们各自与极性声子的 Fröhlich 相互作用被抵消了一部分^[11]. 形式地令 $a_0 \rightarrow 0$,

$$\operatorname{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)]_{T=0} \xrightarrow{a_0 \rightarrow 0} 0, \quad (23)$$

$a_0 \rightarrow 0$ 相当于电子等空穴重合为电中性体, (23)式表明此时的 Fröhlich 相互作用被“关闭”^[8,11].

Rayleigh-Schrödinger 微扰法原则上只有当自能改正的虚部为无穷小量时才适用^[12].

因此设 $\varepsilon(\mathbf{q}) = \varepsilon_{is}^0(\mathbf{q}) + io^+$, o^+ 为一正无穷小量. 通过繁复的积分运算可求得自能改正的虚部为

$$\begin{aligned} \text{Im}[\varepsilon_{is}^{(1)}(\mathbf{q})] = & -(\alpha_c + \alpha_h)\hbar\omega_0 N_-(\omega_0) + [\alpha_c(1 + \gamma_c^2)^{-2} + \alpha_h(1 + \gamma_h^2)^{-2}]\hbar\omega_0 N_-(\omega_0) \\ & - \frac{1}{3}\hbar\omega_0 N_-(\omega_0) \left[\alpha_c \frac{m_c^2}{m^2} (1 - \gamma_c^2)(1 + \gamma_c^2)^{-4} + \alpha_h \frac{m_h^2}{m^2} (1 - \gamma_h^2)(1 + \gamma_h^2)^{-4} \right] a_0^3 q^2, \end{aligned} \quad (24)$$

与求实部时一样只求到 q^2 项. 由(24)式, $T = 0$ 时虚部为零, 这与极化子的情形相类似^[12], 也是预料中应有的结果. 在 $T = 0$ 时不可能发生吸收声子的散射; 并且只要组成激子的电子和空穴的动能都较小, 则 $T = 0$ 时发射声子的几率也为零. (24) 式右端最后一项表明虚部与 q^2 有关, 这表示重整化的激子质心质量可以是复数, 或者说激子寿命与波矢有关.

四、数值结果与实验测定值比较

本节对十一种极性半导体中的1s激子按照上一节得到的自能改正式(18)和(24)进行数值计算, 结果列于表2中. 表1中列出计算时用到的输入数据(m_0 为自由电子质量), 其中 A, B 代表两组不同来源的数据. 表1中同时列出按(19)式计算 $\alpha_c, \alpha_h, \gamma_c, \gamma_h$ 的结果. 表2中第一行则是实验测定的1s激子结合能数据及其来源. 以下对表2中各行作说明, 所有数值结果都是对1s激子的.

表2中第三、四、五、六行列出其它作者的结合能计算结果, 以资比较. 其中文献[7]和[8]用的是变分法, 但他们在有效相互作用势中引入某种变分参量或变分函数, 其物理意义不是很明确; 文献[9]则是用正则变换和微扰法得到有效相互作用势以后再应用变分法的; 文献[11]是运动方程方法.

表2中第二行是 $T = 0$ 时的结合能 $E_b(0)$, 由(18)式,

$$E_b(0) = -R_0 + R_0 \left(1 - \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0}\right) [2 - (1 + \gamma_c)^{-2} - (1 + \gamma_h)^{-2}], \quad (25)$$

$R_0 = \mu e^4 / 2\hbar^2 \varepsilon_\infty^2$. 由表2可见, 计算结果与实验测定的 E_b^{exp} 符合得较好. 表2中第七行是结合能随温度变化的系数, 由(18)式

$$\begin{aligned} (E_b(T) - E_b(0))/n(\omega_0) = & R_0 \left(1 - \frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_0}\right) \left[\frac{1 - \gamma_c^2}{(1 + \gamma_c^2)^2} + \frac{1 - \gamma_h^2}{(1 + \gamma_h^2)^2} - \frac{1}{(1 + \gamma_c)^2} - \frac{1}{(1 + \gamma_h)^2} \right]. \end{aligned} \quad (26)$$

由(26)式, 这个系数随着 γ_c 和 γ_h 的不同既可取正值也可取负值, 说明对于不同的极性半导体, 结合能可以随温度上升而减小, 也可以随温度上升而增加. 出现这样不同趋势的原因解释如下: 结合能并不就是 $\varepsilon_{is}^0(0) + \text{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)]$, 而是^[2,11]

$$E_b(T) = \varepsilon_{is}^0(0) + \text{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)] - \{\text{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)]\}_{a_0 \rightarrow \infty}, \quad (27)$$

即应减去电子和空穴作非相干运动时的自能改正. 从物理的角度看, (27)式中减去的项是相互作用对能隙 E_g 的改正:

$$E_g(T) = E_g + \{\text{Re}[\varepsilon_{is}^{(1)}(0)]\}_{a_0 \rightarrow \infty}, \quad (28)$$

因此

表 1 数值计算的输入数据及 α_e , α_h , γ_e , γ_h 的计算值

		$\frac{m_e}{m_0}$	$\frac{m_h}{m_0}$	ϵ_0	ϵ_∞	$\hbar\omega_0$ (meV)	α_e	α_h	γ_e	γ_h
GaAs	A[7]	0.0658	0.46	12.83	10.9	36.75	0.0681	0.18	1.263	3.339
	B[14]	0.07	0.68	12.9	10.9	36.25	0.0729	0.227	1.173	3.657
InP[14]		0.073	0.4	12.4	9.6	42.84	0.113	0.265	1.18	2.761
CdS	A[7]	0.17	0.60	8.42	5.27	37.83	0.555	1.042	0.433	0.813
	B[4]	0.165	0.6	9.68	5.24	38.0	0.672	1.282	0.435	0.829
CdSe	A[7]	0.12	0.40	9.3	6.1	27	0.438	0.8	0.51	0.931
	B[6]	0.13	0.45	9.7	7.02	27	0.318	0.592	0.559	1.041
CdTe	A[7]	0.094	0.32	9.65	7.2	21.34	0.273	0.503	0.602	1.11
	B[4]	0.09	0.33	10.23	7.21	21.3	0.31	0.574	0.605	1.159
ZnO	A[7]	0.25	1.35	8.15	4.00	73.27	0.867	2.014	0.348	0.809
	B[6]	0.28	0.59	8.47	4.0	72	0.959	1.392	0.406	0.589
ZnS	A[7]	0.19	0.94	8.77	5.20	43.67	0.602	1.339	0.406	0.904
	B[6]	0.21	0.49	8.77	5.2	44	0.63	0.963	0.461	0.704
ZnSe[7]		0.15	0.36	9.1	5.9	31	0.483	0.749	0.515	0.798
ZnTe[7]		0.092	0.54	9.86	7.28	26	0.249	0.604	0.614	1.488
TlCl	A[7]	0.37	0.36	37.60	5.10	21.50	2.592	2.557	0.338	0.336
	B[4]	0.34	0.45	37.6	5.1	21.5	2.485	2.858	0.305	0.351
TlBr	A[7]	0.18	0.38	35.10	5.40	14.30	2.049	2.978	0.304	0.442
	B[4]	0.315	0.36	35.1	5.4	14.3	2.711	2.898	0.293	0.313

$$E_b(T) = [E_g + \epsilon_{is}^0(0) + \text{Re}[\epsilon_{is}^{(1)}(0)]] - E_g(T). \quad (29)$$

$E_b(T)$ 由两项之差组成, 该两项随温度而变化的相对快慢的不同就导致了对不同的极性半导体, $E_b(T)$ 随温度而变化的相反趋势. 表 2 中第八行是 $T = 77\text{K}$ 时 ($E_b(T) - E_b(0)$) 的值. 数据表明, 大多数极性半导体的 $E_b(T)$ 都随温度上升而增加, 只有 TlCl 和 TlBr 的 $E_b(T)$ 随温度上升而减小, 而且减小的趋势较明显, 如 TlBr 在 77K 时 $E_b(T) - E_b(0)$ 可达 -3meV ; 这种情况可能有助于解释实验测得的 TlCl 和 TlBr 的结合能较小的事实.

定义激子质心质量的重整化因子 $\delta(T)$,

$$1/m^*(T) = \frac{1}{m} (1 - \delta(T)) \quad m = m_e + m_h, \quad (30)$$

$m^*(T)$ 为激子的重整化质心质量. 由(18)式易得

$$\delta(0) = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0} \right) \left\{ \frac{m_e}{m_h} [1 - (1 + \gamma_e)^{-1}] + \frac{m_h}{m_e} [1 - (1 + \gamma_h)^{-1}] \right\}. \quad (31)$$

$\delta(0) > 0$, 表示相互作用使质心质量变大. $\delta(0)$ 的数值计算结果列于表 2 第九行中.

表 2 数值计算结果

	GaAs		InP	CdS		CdSe		CdTe		ZnO		ZnS		ZnSe	ZnTe	TlCl		TlBr	
	A	B		A	B	A	B	A	B	A	B	A	B			A	B	A	B
E_g^{sp} (meV)	$-(4.2 \pm 0.2)$ [7]			$-(30 \pm 2)$ [7]		-15 [7]		-12 [7]		-58.8 [7]		$-(41 \pm 1)$ [7]		-21 [7]	-11 [7]	$-(11 \pm 2)$ [7]		-9.8 [7]	
$E_b^{(0)}$ (meV)	-4.2 [15]		-4.9 [15]	-28 [15]		-16 [15]		-10.4 [15]				-38 [7]		-19 [15]	-12.8 [15]			$-(6 \pm 1)$ [7]	
$E_b^{(0)}$ (meV)	-4.85 [15]		-5.3	-35.5 [15]		-18.7 [15]		-12.3 [15]		-74.8 [15]		-40 [15]		-23.1 [15]	-12.5 [15]	-22.7 [15]		-12.1 [15]	
$E_b^{(0)}$ (meV)	-3.7			-28.2		-15.5		-10.9		-50.7		-31.2		-19.1	-10.4	-9.3		-3.5	
$E_b^{(0)}$ (meV)	-4.6							-12.1						-24.1	-12.4	-48.9		-28.7	
$E_b^{(0)}$ (meV)																-33.9		-39.5	
$E_b^{(0)}$ (meV)	-4.9			-28						-57						-15		-8	
$E_b(T) - E_b(0)$ $n(\omega_0)$	-0.402	-0.433	-0.902	-2.23	-2.98	-2.35	-2.09	-1.54	-1.78	-2.77	6.234	-3.58	-1.56	-2.19	-1.76	25.6	27.9	12.27	22.9
$E_b(T) - E_b(0)$ ($T = 77K$) (meV)	-0.002	-0.002	-0.001	-0.01	-0.01	-0.04	-0.04	-0.06	-0.08	~ 0	~ 0	-0.01	-0.002	-0.02	-0.04	1.05	1.14	1.6	3.01
$\delta(0)$	0.178	0.253	0.212	0.213	0.269	0.191	0.161	0.147	0.183	0.426	0.187	0.32	0.162	0.147	0.256	0.198	0.205	0.273	0.186
$\Gamma_{11}(0)/\pi(\omega_0)$	8.701	10.36	15.2	31.24	39.08	19.78	15.9	11.27	13.41	106.6	63.14	47.68	32.3	20.17	17.24	21.43	21.45	17.53	12.93
$\Gamma_{11}(0)$ ($T = 77K$) (cm^{-1})	0.3	0.4	0.2	0.9	1.1	2.8	2.3	3.8	4.6	0.02	0.01	0.6	0.4	1.6	2.8	7.1	7.1	18.6	13.7

对(24)式给出的自能改正虚部,记

$$\Gamma_{1s}(\mathbf{q}) = -\text{Im}[\epsilon_{1s}^{(1)}(\mathbf{q})],$$

则

$$\Gamma_{1s}(0) = \{\alpha_c[1 - (1 + r_c^2)^{-2}] + \alpha_b[1 - (1 + r_b^2)^{-2}]\} \hbar \omega_0 n(\omega_0). \quad (32)$$

(32)式的数值计算结果列于表 2 第十,十一行中. 由表 2 数据可见,低温下线宽 $\Gamma_{1s}(0)$ 较小;共振光散射实验曾估计^[16]对于 CdS $\Gamma_{1s}(0) \leq 1\text{cm}^{-1}$ (低温),与表 2 中数据在数量级上一致. 当然,影响激子寿命的实际因素很可能是复杂的,如杂质和表面散射,声学声子散射等都可能影响激子寿命;本文只讨论了极性声子散射这一种因素.

五、结 语

本文保留了(8)式右端第二项,用积分算符的形式计入粒子-声子相互作用与库仑作用之间的干涉;由表 2 看出得到的数值结果比文献[11]有所改进. 特别是对 TlCl 和 TlBr; 我们认为这可能表明在 TlCl 和 TlBr 中上述两种相互作用过程间的干涉比较强.

本文方法显然也适用于高于 1s 的态. 在引入矩阵形式的 Bethe-Salpeter 方程后,本文方法还可用于各向异性和简并价带的情形(这个推广将另文作出). 本文方法也完全适用于激子与非极性声子的相互作用问题(如压电晶体情形),或者同时考虑光学声子和声学声子的贡献. 文献[12]中曾用微扰法计算多声子散射过程对极化子自能的贡献,采用本文方法,亦可类似地讨论多声子散射过程对激子自能的贡献.

参 考 文 献

- [1] H. Haken, in *Polarons and Excitons*, Plenum Press, New York, (1963), 295.
- [2] S. D. Mahanti, C. M. Varma, *Phys. Rev.* B6 (1972), 2209.
- [3] J. Sak, *Phys. Rev.*, B6(1972), 2226.
- [4] K. K. Bajaj, *Solid State Commun.*, 15(1974), 1221.
- [5] S. Wang, M. Matzuura, *Phys. Rev.*, B10 (1974), 3330.
- [6] H. Fock *et al.*, *Phys. Stat. Sol.*, b72(1975), 155.
- [7] K. Hattori, *Phys. Stat. Sol.*, b76 (1976), 281.
- [8] J. Pollmann, H. Buttner, *Phys. Rev.*, B16 (1977), 4480.
- [9] 顾世清, *物理学报*, 30(1981), 705.
- [10] U. Rossler, H. R. Trebin, *Phys. Rev.*, B23(1981), 1961.
- [11] A. Oswald, I. Egri, *Phys. Rev.*, B28(1983), 3291.
- [12] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York, (1981), Sec. 6. 1.
- [13] F. W. Byron, R. W. Fuller, *物理学中的数学方法*, 中译本, 科学出版社, (1982), 第八章.
- [14] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 5th ed., John Wiley and Sons, Inc., (1976), Chap. 8 and 10.
- [15] C. Weisbuch, R. G. Ulbrich, in *Light Scattering in Solids III*, Springer-Verlag, Berlin, (1982), 207.
- [16] M. Matzushita, *et al.*, *Phys. Rev.*, B29(1984), 3362.

附 录

由于(18)式中各项的逆算符的展开方式相似,以下只以两项为例加以说明:

$$\frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{V} \sum_{k'} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) ((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1} [\mathbf{k}, \mathbf{k}'] \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) \quad (\text{A.1})$$

和

$$\frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{V} \sum_{k'} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) ((\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)1 - U)^{-1} [\mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{p}] \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}'). \quad (\text{A.2})$$

为书写简便,重复变量将表示求和. 由(18)式,逆算符展开为

$$(1 - U(\mathbf{q}, \mathbf{p})/(\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0))^{-1} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)^{-n} (U(\mathbf{q}, \mathbf{p}))^n. \quad (\text{A.3})$$

所以 (A.1) 式为

$$\sum_{n=0}^{\infty} (\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)^{-(n+1)} \frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{V} \sum_{k'} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) (U(\mathbf{q}, \mathbf{p}))^n [\mathbf{k}, \mathbf{k}'] \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}'),$$

将幂次为 $n+1$ 的那一项详细写出为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{V} \sum_{k'} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) U[\mathbf{k}, \mathbf{k}_1] \cdots U[\mathbf{k}_{n-1}, \mathbf{k}_n] \\ & \times \left\{ (2\pi)^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{p})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h} \mathbf{k}'^2 \right) \delta(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}') - V(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}') \right\} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}') \\ & = \frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{V} \sum_{k'} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) U'[\mathbf{k}, \mathbf{k}_1] \cdots U'[\mathbf{k}_{n-1}, \mathbf{k}_n] \\ & \times \left\{ (2\pi)^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{k}' - \mathbf{p})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h} (\mathbf{k}' - \mathbf{q})^2 \right) \delta(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}') - V(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}') \right\} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

后一步已对所有积分变量作了一个平移: $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{q}$. 式中

$$\begin{aligned} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) &= 8(\pi a_0^3)^{1/2} \left[1 + a_0^2 \left(\mathbf{k} - \frac{m_e}{m} \mathbf{q} \right)^2 \right]^{-1}, \\ U'(\mathbf{q}, \mathbf{p})[\mathbf{k}, \mathbf{k}'] &= (2\pi)^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{k} - \mathbf{p})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h} (\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 \right) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

满足 $U'(\mathbf{q}, 0)|\varphi_{q'}^{1/2}\rangle = \varepsilon_{1s}^0(\mathbf{q})|\varphi_{q'}^{1/2}\rangle$. 所以

$$(\text{A.4}) \text{ 式为 } \frac{1}{V} \sum_k \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) U'[\mathbf{k}, \mathbf{k}_1] \cdots U'[\mathbf{k}_{n-1}, \mathbf{k}_n] \left\{ \varepsilon_{1s}^0(\mathbf{q}) + \frac{\hbar^2}{2m_e} ((\mathbf{k}_n - \mathbf{p})^2 - \mathbf{k}_n^2) \right\} \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}_n). \quad (\text{A.6})$$

显然有

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} ((\mathbf{k}_n - \mathbf{p})^2 - \mathbf{k}_n^2) = \frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{p}^2 - 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_n).$$

以下我们要近似略去 $-\frac{\hbar^2}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_n$ 这一项, 理由为: 1) 对 U 的一阶项, (A.6) 式为

$$\frac{1}{V} \sum_k \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}) \left(\varepsilon_{1s}^0(\mathbf{q}) + \frac{\hbar^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k} \right) \varphi_{q'}^{1/2}(\mathbf{k}),$$

令 $\mathbf{q} = 0$, 此式中与 $-\frac{\hbar^2}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}$ 有关的项的被积函数是奇函数, 积分贡献为零; 这就是说, 对 U 的一阶项, 当

$\mathbf{q} = 0$ 时确实可以略去 $-\frac{\hbar^2}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_n$. 2) 如在 (A.4) 式的 U 算符之间插入完全集求和式

$$\sum_M |\varphi_M\rangle \langle \varphi_M| = 1,$$

求和 $\sum_M$ 通过电子-空穴二体系统的所有可能状态, 则 (A.6) 式为

$$\frac{1}{V} \sum_k \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}) U'[\mathbf{k}, \mathbf{k}_1] \cdots U'[\mathbf{k}_{n-1}, \mathbf{k}_n] \sum_M \varphi_M(\mathbf{k}_n) \varphi_M^*(\mathbf{k}_n) \\ \times \left\{ \varepsilon_{1s}^0(\mathbf{q}) + \frac{\hbar^2}{2m_e} (p^2 - 2\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_n) \right\} \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}_n),$$

当 $\mathbf{q} = 0$ 时, 只要近似认为起作用的中间态 $|\varphi_M\rangle$ 都具有 s 态对称性(由文献[1], 在直接带隙点具有电偶极活性的束缚激子态必须具有 s 态对称性), 则 $-\frac{\hbar^2}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_n$ 项的积分贡献为零. 3) 我们将看到, 采用略去 $-\frac{\hbar^2}{m_e} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_n$ 项的近似后, 得到的结果与实验是相符的. 文献[11]在积分时也采用了类似的近似. 于是

$$(A.1) \text{ 式为 } \frac{1}{V} \sum_k \sum_{n=0}^{\infty} (\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0)^{-(n+1)} \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}) \left(\varepsilon_{1s}^0(\mathbf{q}) + \frac{\hbar^2}{2m_e} p^2 \right)^n \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}) \\ = \frac{1}{V} \sum_k \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}) \left(\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0 - \varepsilon_{1s}^0(\mathbf{q}) - \frac{\hbar^2}{2m_e} p^2 \right)^{-1} \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}). \quad (A.7)$$

对 (A.2) 式采用完全类似的办法, 对 U^{n+1} 幂次项有

$$\frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{V} \sum_{k'} \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}) U[\mathbf{k}, \mathbf{k}_1] \cdots U[\mathbf{k}_{n-1}, \mathbf{k}_n] \\ \cdot \left\{ (2\pi)^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{p}) + \frac{\hbar^2}{2m_h} \mathbf{k}'^2 \right) \delta(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}' - \mathbf{p}) - V(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}' - \mathbf{p}) \right\} \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}'),$$

除了 $\mathbf{k}'$ 以外, 所有积分变量都作一平移: $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{p}$, 记

$$U''(\mathbf{q}, \mathbf{p})[\mathbf{k}, \mathbf{k}'] = (2\pi)^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h} (\mathbf{k} + \mathbf{p})^2 \right) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (A.8)$$

则在上述近似下有

$$(A.2) \text{ 式为 } \frac{1}{V} \sum_k \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k} + \mathbf{p}) \left(\varepsilon(\mathbf{q}) - \hbar\omega_0 - \varepsilon_{1s}^0(\mathbf{q}) - \frac{\hbar^2}{2m_h} p^2 \right)^{-1} \varphi_{q'}^{1s'}(\mathbf{k}). \quad (A.9)$$

AN INTEGRAL OPERATOR METHOD TO STUDY THE PROBLEM OF EXCITON-PHONON INTERACTION

ZHENG HANG FANG JUN-XIN

(Department of Applied Physics, Shanghai Jiaotong University)

ABSTRACT

In this article, taking the exciton and polar-phonon interaction as an example, we introduce an integral operator to deal with the dynamical problem of exciton-phonon interaction. Compared with the methods of earlier authors, our method has some characteristics: besides the binding energies which agree with the measured data of experiments, the lifetime of excitons, the renormalization factors of translational masses, and the relation between these quantities and temperature, are obtained simultaneously. This method may be used not only for the 1s state, but also the states higher than 1s state. Furthermore, this method may be extended to the anisotropic case and the case of degenerate valence band conveniently.