

n 维固体带间光学性质与振子模型

$n/2$ 次积分关系

何星飞 莫 党

(中山大学微电子研究所)

1986 年 12 月 23 日收到

提 要

本文证明, n 维固体临界点附近的带间介电函数及其微分谱可用 $n/2$ 次积分分别从振子的介电函数及其微分谱求出. n 维固体带间光谱中的振子物理特征通过 $n/2$ 次积分算符的作用表现出来. 文中讨论了带间跃迁与振子模型, 光学性质与维度性之间的物理联系. 在固体带间光谱的分数次积分表达式中, 维度 n 可以推广到分数维数.

一、引 言

近几年来, 低维凝聚态物理的进展揭示了空间维度性对物理特性的重要影响^[1]. 低维物理体系的性质可以不同于三维体系, 会出现某些三维体系没有的现象, 如一维导体的 Peierls 相变, 二维电子体系的量子 Hall 效应等等. 更有趣的是, 除了一维和二维体系外, 还发现了具有分数维数的物理体系^[2]. 因此, 凝聚态物理性质与维度性关系的研究具有十分重要的意义.

固体的带间光学性质充分地反映了固体的维度性. 20 多年来发展起来的调制光谱术和椭偏光谱术已成为研究固体电子结构的有力手段^[3,4]. 由调制光谱测得的微分能谱^[5]或由椭偏光谱测得的介电函数谱^[6]能有效地分析不同维度固体的电子结构. Okuyama 等人^[7]曾导出一维、二维和三维固体临界点附近的带间介电函数及其微分谱的近似表达式. 利用这些表达式, 由实验测得的微分谱或介电函数谱可确定一维、二维和三维固体的临界点参量: 临界点能量和 Lorentz 宽度常数. 然而, Okuyama 等人的表达式未能反映固体光学性质与维度性之间的联系. 有时所研究固体的维度未能事先知道, 甚至可以随外界条件的改变而变化^[8,9], 从这些表达式就难以分析实验结果.

我们最近把分数次积分方法应用于固体的光学性质研究^[10], 不同维度固体的带间光学响应用分数次积分形式统一地表达出来^[11]. 本文证明, n 维固体临界点附近的带间介电函数及其微分谱可用分数次积分方法分别由振子的介电函数及其微分谱求出. 并讨论了不同维度固体带间跃迁与振子模型, 固体光学性质与维度性之间的物理联系. 值得指出的是, 由于分数次积分的次数可以连续变化, 带间介电函数及其微分谱的分数次积分表

达式中维度 n 可以推广到分数维。这为研究固体光学性质与维度性之间的关系提供了新的途径。并且,由实验测得的光谱,可以分析固体的维度。

二、不同维度固体的带间介电函数: 分数次积分表述

n 维固体临界点附近电子直接允许跃迁的带间介电函数可表为 $n/2$ 次积分形式^[11]

$$\varepsilon(\hbar\omega) = \frac{i^{r-n} M_n}{(\hbar\omega)^2} \frac{d^{-n/2}}{dE_g^{-n/2}} \frac{1}{E_g - \hbar\omega - i\Gamma}, \quad (1)$$

式中

$$M_n = (m_1 m_2 \cdots m_n)^{1/2} |\langle c | \mathbf{a} \cdot \mathbf{p} | v \rangle|^2 \left(\frac{2e}{m} \right)^2 \frac{\hbar^{2-n}}{(2\pi)^{n/2} \varepsilon_0},$$

$\hbar\omega$ 为光子能量, E_g 和 Γ 分别为临界点能量和 Lorentz 唯象宽度常数, r 为临界点类型 ($0 \leq r \leq n$)。符号 $\frac{d^q f(x)}{dx^q}$ 表示函数 $f(x)$ 对 x 的 q 次微积分 ($q > 0$ 为微分, $q < 0$ 为积分), q 可以是整数,也可以是分数,微积分的上下限分别为 0 和 x 。有关分数次微积分的定义,性质和计算方法,可参阅文献[12]。

(1) 式把不同维度体系的介电函数用分数次积分形式统一地表达出来。不同维度体系的带间光学性质都可以用简单的分数次积分方法求得。在数学上,由于分数次积分的次数可以连续变化,(1)式中维度 n 是一个可以连续变化的物理量。

三、带间跃迁与振子模型

具有共振能量 E_0 和半值宽度 Γ 的振子的介电函数可写为

$$\varepsilon_{HO}(\hbar\omega, E_0) = 1 + \frac{E_p^2}{2E_0} \left(\frac{1}{E_0 + \hbar\omega + i\Gamma} + \frac{1}{E_0 - \hbar\omega - i\Gamma} \right), \quad (2)$$

式中 E_p 为等离子能。由量子理论可知^[4],任何固体的介电函数总可表示为不同态振子谱线的迭加

$$\varepsilon(\hbar\omega) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \varepsilon_{HO}(\hbar\omega, E_{\mathbf{k}}), \quad (3)$$

$f_{\mathbf{k}}$ 为振子强度。因此,任一固体的光学性质总包含着振子的物理特征。下面可以看到,由(1)式所描述的固体带间跃迁光学性质,振子的物理特征由分数次积分算符的作用表现出来。

对于临界点附近 $\hbar\omega \approx E_g$ 的能量,由(1)和(2)式容易证明, n 维固体介电函数可表为振子介电函数的 $n/2$ 次积分

$$\varepsilon(\hbar\omega) = \frac{i^{r-n} A_n}{(\hbar\omega)^2} \frac{d^{-n/2}}{dE_g^{-n/2}} [E_g \varepsilon_{HO}(\hbar\omega, E_g)], \quad (4)$$

式中 $A_n = 2M_n/E_p^2$. 计算中略去了对光谱结构没有贡献的所谓本底光谱. 类似地, n 维固体介电函数的 k 阶微分谱可表为振子介电函数 k 阶微分谱的 $n/2$ 次积分

$$\varepsilon^{(k)}(\hbar\omega) = \frac{i^{r-n} A_n}{(\hbar\omega)^2} \frac{d^{-n/2}}{dE_g^{-n/2}} [E_g \varepsilon_{Ho}^{(k)}(\hbar\omega, E_g)], \quad (5)$$

因为 $\hbar\omega \approx E_g$, 计算时因子 $(\hbar\omega)^{-2}$ 近似看成常数. (4)式和(5)式有明确的物理意义, 不同维度固体的带间跃迁光学性质统一地表为能谱表象中振子谱线的简单分数次积分, 不同维度体系的带间光学响应都可以从振子谱线求出, 它们均为 $n/2$ 次积分算符作用于振子谱线的结果.

图1和图2分别为应用(4)式和(5)式由振子谱线计算出的不同维度固体最小值临界点 $P_0(n=1)$, $D_0(n=2)$ 和 $M_0(n=3)$ 附近的介电函数及其 k 阶微分谱. 计算时, E_g

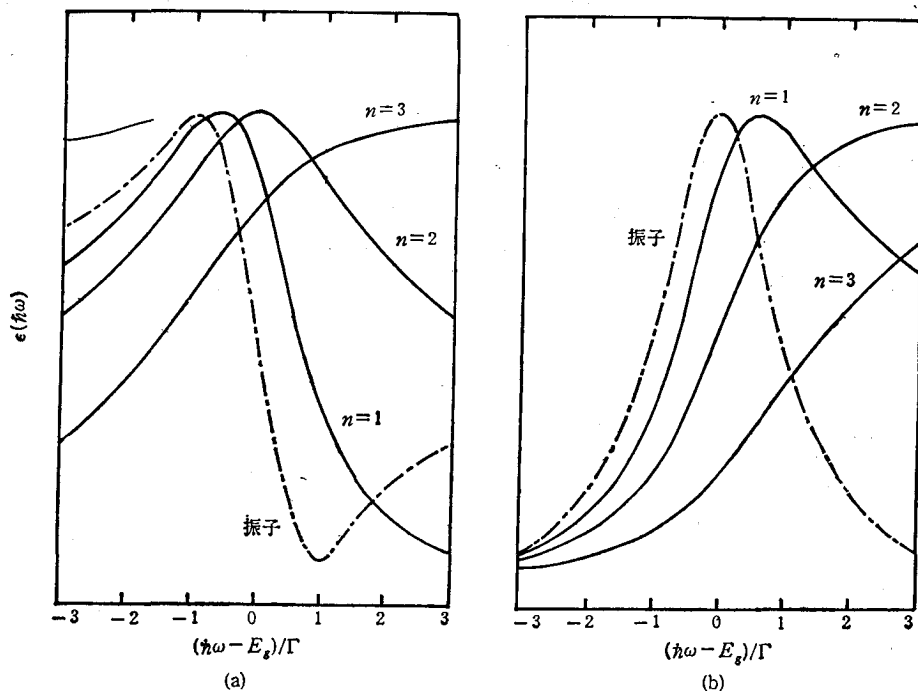


图1 由(4)式从振子的介电函数(点划线)计算出的不同维度最小值临界点 $P_0(n=1)$, $D_0(n=2)$ 和 $M_0(n=3)$ 附近的带间介电函数(实线)的实部 (a)和虚部 (b) E_g 和 Γ 分别为临界点能量和 Lorentz 宽度常数

和 Γ 的值分别取: $E_g = 1\text{eV}$, $\Gamma = 0.06\text{eV}$ (P_0); $E_g = 3\text{eV}$, $\Gamma = 0.04\text{eV}$ (D_0); $E_g = 5\text{eV}$, $\Gamma = 0.02\text{eV}$ (M_0). 从图1和图2中不同维度固体的带间光谱可以看到这些谱线所包含的振子光谱特征. 由(3)式所描述的固体光学性质与振子模型的一般关系在这里即为(4)和(5)式的简单分数次积分, 图1和图2中谱线的振子特征正是通过分数次积分算符的作用表现出来的.

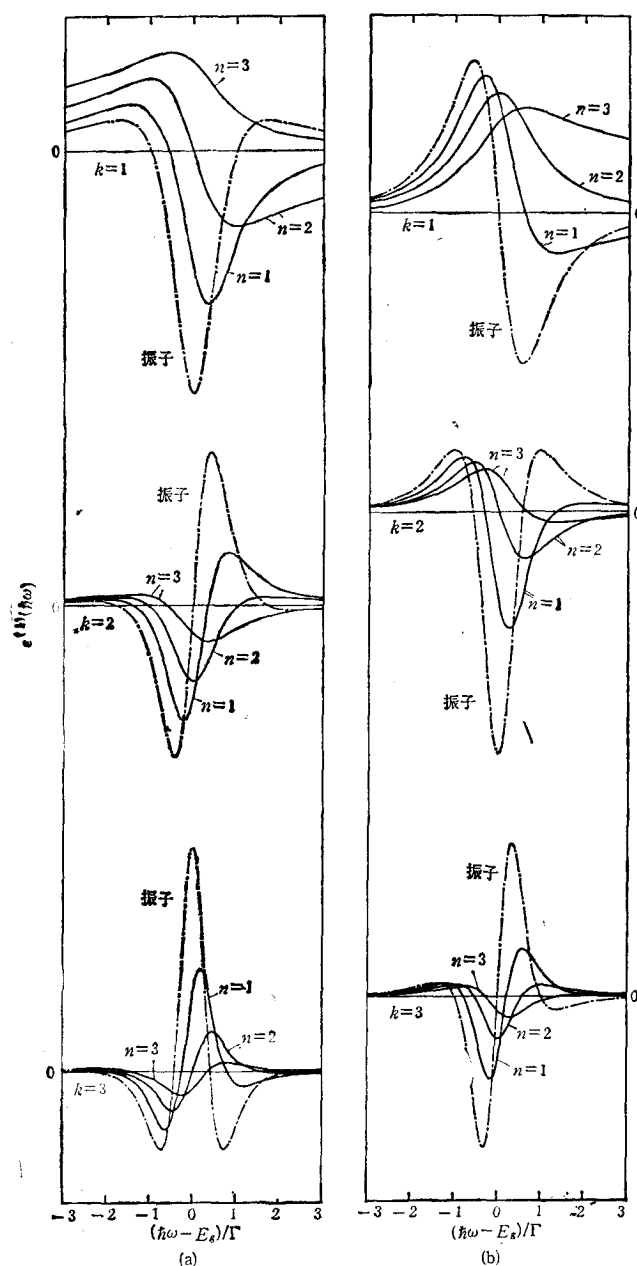


图2 由(5)式从振子介电函数的 k 阶微分谱(点划线)计算出的不同维度最小值临界点 $P_0(n=1)$, $D_0(n=2)$ 和 $M_0(n=3)$ 附近带间介电函数的 k 阶微分谱($k=1, 2, 3$) E_g 和 Γ 分别为临界点能量和 Lorentz 宽度常数; (a)为实部; (b)为虚部

四、光学性质与维度性

分数次积分表达式(4)和(5)反映了固体的光学性质与维度性之间的依赖关系。这种

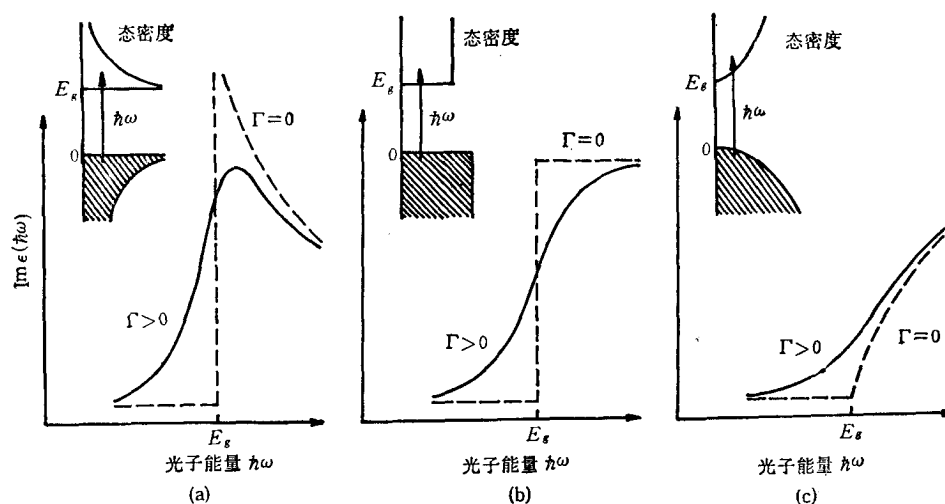


图3 不同维度固体最小值临界点附近的带间吸收谱及相应的能带态密度

$\Gamma = 0$ 时的吸收谱即为联合态密度 (JDOS)

(a) P_0 (一维); (b) D_0 (二维); (c) M_0 (三维)

关系不是一般的函数表示,而是通过不同次数的积分算符表达出来。从图1和图2中分别由振子谱线求出的 n 维固体带间光谱可以看到光学性质随维度性的变化关系。随着维度 n 的增加,整个谱线逐渐向能量高的方向移动,这些谱线好似是由振子谱线不断往能量高的方向“拉伸”而成。固体的光学性质取决于固体的能带结构。见图3,固体的带间吸收与态密度有着直接的联系。若 Lorentz 宽度 $\Gamma \rightarrow 0$, 这时带间吸收谱即是联合态密度 (JDOS)。不同维度固体的光学性质并不是相互孤立的,它们由(4)和(5)式的分数次积分相互联系着,因而不同维度固体的态密度之间也同样地相互联系着。可见,(4)和(5)式既表达了不同维度固体光学性质之间的物理联系,也表达了不同维度固体态密度之间的相互联系。这种联系反映了固体中电子的动力学性质如何依赖于固体的维度性。

对于体状、层状和链状结构的固体, n 分别取3,2和1,可由(4)和(5)式计算出相应的带间光谱。对于非严格一维和二维的一般各向异性固体,JDOS随各向异性参数的变化而改变^[3]。若这些各向异性固体的JDOS仍用能量的幂函数表示:

$$G(E) \sim (E - E_g)^{n/2-1},$$

不过这时 n 不是整数而是等效的分数形式,则(4)和(5)式对一般各向异性固体仍然成立,式中 n 就是体系的等效维度。这时 n 既可以为整数,也可以为分数。事实上,固体或多或少都具有三维特性,我们把层状和链状固体近似地看成是二维和一维体系,都是为了模型的简单和数学上处理的方便。最近几年来,在凝聚态物理领域里发现了不少具有分数维数的结构体系^[2]和维度变化的物理过程^[8,9]。等效维度连续变化的典型例子是薄膜的生长过程:在InP衬底上用电化学方法淀积生成Pt薄膜^[14]。起初,Pt原子以岛状淀积在衬底上,尔后形成随机枝状结构,随淀积Pt原子的不断增多,薄膜厚度不断增加,最后达到稳定状态。用光谱法和有效介质近似分析的结果清楚地表明,薄膜生长过程的等效维度从一维连续地变为二维,最后变为三维。应用本文所述的分数次积分方法分析类似的物理过程,不必借用有效介质近似,可以从测得的光谱直接分析出体系等效维度的变化情况。

作者相信,分数次微积分将为低维凝聚态和各向异性体系的物理性质研究,特别是体系的维度性分析提供新的方法和工具。

本校郑家龙的有益讨论使作者注意到分数次微积分应用于固体光学性质研究的可能性,加拿大 Trent 大学 K. B. Oldham 教授曾与作者就分数次微分数学公式进行过交流。作者在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] 孙鑫, 物理学进展, **5**(1985), 467.
- [2] L. Pietronero and E. Tosatti, ed. *Fractals in Physics*, North-Holland, Amsterdam, (1986).
- [3] Y. Hamakawa and T. Nishino, in *Optical Properties of Solids: New Developments*, ed. B. O. Seraphin, North-Holland, Amsterdam, (1976), p. 255.
- [4] D. E. Aspnes, in *Optical Properties of Solids: New Developments*, ed. B. O. Seraphin, North-Holland, Amsterdam, (1976), p. 799.
- [5] M. Cardona, *Modulation Spectroscopy*, Academic, New York, (1969).
- [6] D. E. Aspnes, *Surf. Sci.*, **135**(1983), 284.
- [7] M. Okuyama, T. Nishino and Y. Hamakawa, *J. Phys. Soc. Jap.*, **35**(1973), 134.
- [8] J. G. Tobin, S. W. Robey, L. E. Klebanoff and D. A. Shirley, *Phys. Rev.*, **B23**(1933), 6169.
- [9] J. G. Dash, *Phys. Today*, **38**(11) (1985), 26.
- [10] 何星飞、莫党, 第三届全国固体光学性质学术会议论文摘要集, 天津, (1986), 19 页.
- [11] He Xingfei (何星飞) and Mo Dang (莫党), *Chin. Phys. Lett.* **3**(1986), 565.
- [12] K. B. Oldham and J. Spanier, *The Fractional Calculus*, Academic, New York, (1974).
- [13] M. Okuyama, T. Nishino and Y. Hamakawa, *J. Phys. Soc. Jap.* **37**(1974), 431.
- [14] D. E. Aspnes, *Appl. Surf. Sci.*, **22/23**(1985), 792.

INTERBAND OPTICAL PROPERTIES OF AN n -DIMENSIONAL SOLID AND HARMONIC OSCILLATOR MODEL THE $N/2$ -FOLD INTEGRAL RELATIONS

HE XING-FEI MO DANG

(Institute of Microelectronics, Zhongshan University, Guangzhou)

ABSTRACT

We demonstrate that the interband dielectric function and its k -th derivative spectrum near an n -dimensional critical point can be evaluated from the harmonic oscillator dielectric function and its k -th derivative spectrum, respectively, by using $n/2$ -fold integration. The physical characteristics of harmonic oscillator in the interband spectra of an n -dimensional solid are exhibited by the action of $n/2$ -fold integral operator. Relations between interband transitions and harmonic oscillator model, and between optical properties and dimensionality are discussed. In the fractional integral expressions for the interband optical responses, dimensionality n can be generated to an arbitrary continuous parameter.