

半导体超晶格中的有效弹性模量

熊 小 明 陶 瑞 宝
(复旦大学物理系)

1987 年 10 月 12 日收到

在长弹性波近似下,利用双时格林函数的处理方法,得到了 GaAs-GaAlAs 型半导体超晶格的有效弹性模量。从所得结果发现有效弹性系数总是不大于组成超晶格的两种介质的弹性系数的平均值。在其中一种介质的宽度 $b = 0$ 和 $b = a$ (a 为超晶格周期)的极限情况下,所得结果退化为单一介质的弹性模量。

一、引 言

材料工程对具有异常物理性质的人造半导体超晶格作了广泛的研究。这些自然界中不存在的新材料的生产吸引了不少科技人员^[1-7]。这不仅由于复合的超晶格材料具有与组成它的单种介质不同的力学、电学、磁学和超导等物理性质,更重要的是对这种材料的研究将成为很多半导体新器件的基础,影响着未来半导体器件的发展。近几年中,半导体超晶格中电子气的运动性质无论在实验上还是理论上都作了广泛的讨论^[8-12]。各种新型的元激发及其受环境(包括界面及外加磁场)的影响都有着定性和定量的研究。然而,在这些研究中,层状电子气赖以生存的半导体晶格点阵及其对电子气的影响则采用均匀的正电背景模型,用一种平均效应作近似处理。由于 GaAs-GaAlAs 是一种极性半导体,电声子的耦合是很重要的。随着研究的进一步深入,晶格的运动必然会重新被重视。

半导体超晶格是由两种或两种以上的不同半导体材料沿空间某一方向交替排列所构成的一种特殊物质。由于分子束外延技术的发展,可以用结构相似具有良好匹配参数的半导体材料产生高质量的超晶格。典型的超晶格是两种不同半导体沿其生长方向排列的一系列平行平面。本文中,我们选取两种立方晶系的介质 I 和 II 所组成的半导体超晶格,讨论它的有效弹性模量。这是一类很典型的超晶格。研究较多的 GaAs-GaAlAs 以及 A-15 结构的超导材料都具有立方对称性。

设两种介质的弹性系数和密度分别为 $(c_{11}, c_{12}, c_{44}, \rho)$ 和 $(c_{11} + \Delta c_{11}, c_{12} + \Delta c_{12}, c_{44} + \Delta c_{44}, \rho + \Delta \rho)$, 在 x, y 方向具有平移对称性,沿 z 方向如图 1 所示周期性地交替变化,周期为 a , 介质 II 的宽度为 b 。

密度 $\rho(\mathbf{r})$ 的分布函数如图 2 所示。

$$\rho(\mathbf{r}) = \begin{cases} \rho & z \in \text{I}, \\ \rho + \Delta \rho & z \in \text{II}, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $\mathbf{r}$ 为 (x, y, z) 三维位置矢量。对(1)式作傅里叶展开,可得

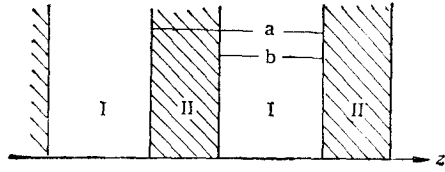


图 1

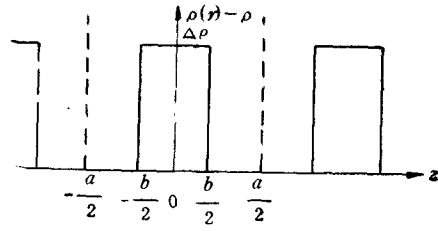


图 2

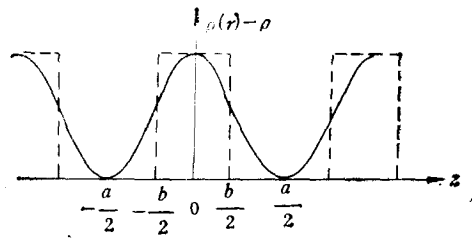


图 3

$$\rho(\mathbf{r}) - \rho = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda_n e^{i \frac{2\pi n z}{a}}. \quad (2)$$

其中

$$\lambda_n = \frac{1}{a} \int_{-b/2}^{b/2} \Delta \rho e^{-i \frac{2\pi n z}{a}} dz = \Delta \rho \lambda'_n,$$

$$\lambda'_n = \frac{1}{n\pi} \sin \frac{b}{a} n\pi.$$

同样,我们可得弹性模量的分布及其傅里叶展开式

$$c(\mathbf{r}) - c = \Delta c \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \lambda'_n e^{i \frac{2\pi n z}{a}}, \quad (2')$$

其中 c 为弹性模量 c_{11} , c_{12} 和 c_{44} 的简单标记。因此, $\rho(\mathbf{r})$ 及 $c(\mathbf{r})$ 可写成各次谐波的分量迭加。

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \rho_0 + \Delta \rho \sum_{n=1}^{\infty} \lambda'_n (e^{i \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{r}} + e^{-i \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{r}}), \\ c(\mathbf{r}) &= c^0 + \Delta c \sum_{n=1}^{\infty} \lambda'_n (e^{i \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{r}} + e^{-i \mathbf{q}_n \cdot \mathbf{r}}), \end{aligned} \quad (3)$$

式中 $\rho_0 = \rho + \frac{b}{a} \Delta \rho$, $c^0 = \frac{b}{a} \Delta c$, $\mathbf{q}_n = \left(0, 0, \frac{2\pi n}{a}\right)$ 。

为了讨论的简单,我们首先只考虑 $n=1$ 的项。这是最低次的谐波分量,如图 3 所示。这时(3)式化为

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 + \lambda \Delta \rho (e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}),$$

$$c(\mathbf{r}) = c^0 + \lambda \Delta c (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}), \quad (3')$$

其中 $\lambda = \lambda'_1 = \frac{1}{\pi} \sin \frac{b\pi}{a}$, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 = (0, 0, \frac{2\pi}{a})$. 经过仔细的分析可知, 当计入高次谐波的贡献时, 只需将下面(23)式中的 λ^2 替换为 Λ^2

$$\Lambda^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |\lambda'_n|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{n\pi} \sin \frac{n\pi b}{a} \right]^2. \quad (4)$$

二、哈密顿量

设 $u_\alpha(\mathbf{r})$ 为 $\alpha (=1, 2, 3$ 或 $x, y, z)$ 方向的弹性振动的位移矢量, $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ 为应变张量. $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} [\partial_\alpha u_\beta(\mathbf{r}) + \partial_\beta u_\alpha(\mathbf{r})]$. 则晶体的哈密顿量表示为

$$H = T + U, \quad (5a)$$

$$T = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \sum_\alpha \dot{u}_\alpha^*(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) \dot{u}_\alpha(\mathbf{r}), \quad (5b)$$

$$U = \int d^3\mathbf{r} \sum_{ij} \sum_{kl} c_{ijkl} \varepsilon_{ij}^*(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}), \quad (5c)$$

其中 T 为弹性振动能, U 为弹性势能. $\dot{u}_\alpha$ 表示 u_α 对时间求导, c_{ijkl} 为晶体的弹性模量张量. 对立方晶系, c_{ijkl} 只有三个独立量, 这就是通常所称的弹性模量.

$$\begin{aligned} c_{iiii} &= c_{1111} = c_{11}(\mathbf{r}), \\ c_{ijij} &= c_{1212} = c_{44}(\mathbf{r}) \quad i \neq j, \\ c_{iijj} &= c_{1122} = c_{12}(\mathbf{r}) \quad i \neq j. \end{aligned}$$

因此, 势能化为

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \left\{ \sum_\alpha c_{11}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\alpha\alpha}^* \varepsilon_{\alpha\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta} 2c_{44}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\alpha\beta}^* \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\alpha \neq \beta} c_{12}(\mathbf{r}) \varepsilon_{\alpha\alpha}^* \varepsilon_{\beta\beta} \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

将(4)式代入(5b)和(6)式, 并完成傅里叶变换(见附录 A), 得

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_\alpha \sum_{\mathbf{k}} \{ \rho_0 |\dot{u}_\alpha(\mathbf{k})|^2 + \lambda \Delta \rho \dot{u}_\alpha^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \dot{u}_\alpha(\mathbf{k}) \\ &\quad + \lambda \Delta \rho \dot{u}_\alpha^*(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \dot{u}_\alpha(\mathbf{k}) \}, \end{aligned} \quad (7a)$$

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \sum_\alpha \sum_{\mathbf{k}} [(c_{11}^0 - c_{44}^0) k_\alpha^2 + c_{44}^0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}] |u_\alpha(\mathbf{k})|^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{\mathbf{k}} (c_{12}^0 + c_{44}^0) k_\alpha k_\beta u_\alpha^*(\mathbf{k}) u_\beta(\mathbf{k}) \\ &\quad + \frac{\lambda}{2} \sum_\alpha \sum_{\mathbf{k}} \{ [(\Delta c_{11} - \Delta c_{44})(k_\alpha + q_\alpha) k_\alpha \\ &\quad + \Delta c_{44}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{k}] u_\alpha^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}) u_\alpha(\mathbf{k}) \\ &\quad + [(\Delta c_{11} - \Delta c_{44})(k_\alpha - q_\alpha) k_\alpha \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \Delta c_{44}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{k} \} u_{\alpha}^*(\mathbf{k} - \mathbf{q}) u_{\alpha}(\mathbf{k}) \} \\
& + \frac{\lambda}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{\mathbf{k}} \{ [\Delta c_{12}(k_{\alpha} + q_{\alpha}) k_{\beta} + \Delta c_{44}(k_{\beta} + q_{\beta}) k_{\alpha}] \\
& \times u_{\alpha}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}) u_{\beta}(\mathbf{k}) + [\Delta c_{12}(k_{\alpha} - q_{\alpha}) k_{\beta} \\
& + \Delta c_{44}(k_{\beta} - q_{\beta}) k_{\alpha}] u_{\alpha}^*(\mathbf{k} - \mathbf{q}) u_{\beta}(\mathbf{k}) \}, \quad (7b)
\end{aligned}$$

其中 $u_{\alpha}(\mathbf{k})$ 为 u_{α} 的傅氏分量, $u_{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V^{1/2}} \int d^3r u_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, V 为体积.

定义产生、湮灭算子^[13]

$$b_{\alpha}^+(\mathbf{k}) = \left(\frac{\rho_0 \omega_{\alpha}}{2} \right)^{1/2} \left[\frac{\dot{u}_{\alpha}^*(\mathbf{k})}{\omega_{\alpha}} + i u_{\alpha}(\mathbf{k}) \right], \quad (8a)$$

$$b_{\alpha}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\rho_0 \omega_{\alpha}}{2} \right)^{1/2} \left[\frac{\dot{u}_{\alpha}(\mathbf{k})}{\omega_{\alpha}} - i u_{\alpha}^*(\mathbf{k}) \right], \quad (8b)$$

其中 $\omega_{\alpha}^2 = [(c_{11}^0 - c_{44}^0)k_{\alpha}^2 + c_{44}^0 k^2] / \rho_0$. 注意到 $\dot{u}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \dot{u}_{\alpha}^*(-\mathbf{k})$, $u_{\alpha}(\mathbf{k}) = u_{\alpha}^*(-\mathbf{k})$, $\omega_{\alpha}(\mathbf{k}) = \omega_{\alpha}(-\mathbf{k})$, 可得

$$b_{\alpha}(-\mathbf{k}) = \left(\frac{\rho_0 \omega_{\alpha}}{2} \right)^{1/2} \left[\frac{\dot{u}_{\alpha}^*(\mathbf{k})}{\omega_k} - i u_{\alpha}(\mathbf{k}) \right], \quad (8c)$$

$$b_{\alpha}^+(-\mathbf{k}) = \left(\frac{\rho_0 \omega_{\alpha}}{2} \right)^{1/2} \left[\frac{\dot{u}_{\alpha}(\mathbf{k})}{\omega_k} + i u_{\alpha}^*(\mathbf{k}) \right]. \quad (8d)$$

不难证明, $u_{\alpha}(\mathbf{k})$, $\dot{u}_{\alpha}(\mathbf{k})$ 及其复共轭可用 b 及 b^+ 表示为

$$\begin{aligned}
u_{\alpha}(\mathbf{k}) &= -i [b_{\alpha}^+(\mathbf{k}) - b_{\alpha}(-\mathbf{k})] / (2\rho_0 \omega_{\alpha})^{1/2}, \\
\dot{u}_{\alpha}(\mathbf{k}) &= \omega_{\alpha} [b_{\alpha}(\mathbf{k}) + b_{\alpha}^+(-\mathbf{k})] / (2\rho_0 \omega_{\alpha})^{1/2}, \\
u_{\alpha}^*(\mathbf{k}) &= i [b_{\alpha}(\mathbf{k}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k})] / (2\rho_0 \omega_{\alpha})^{1/2}, \\
\dot{u}_{\alpha}^*(\mathbf{k}) &= \omega_{\alpha} [b_{\alpha}^+(\mathbf{k}) + b_{\alpha}(-\mathbf{k})] / (2\rho_0 \omega_{\alpha})^{1/2}. \quad (9)
\end{aligned}$$

并且算符 $b_{\alpha}(\mathbf{k})$ 和 $b_{\alpha}^+(\mathbf{k})$ 满足对易关系

$$[b_{\alpha}(\mathbf{k}), b_{\beta}^+(\mathbf{k}')] = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}}'. \quad (10)$$

在长弹性波近似下, $|\mathbf{k}|$ 很小, 只考虑 $|\mathbf{k}| < q$ 的情况, 即 $\mathbf{k}$ 局限于第一布里渊区. 于是二次量子化的有效哈密顿量可用算符 b 及 b^+ 表示,

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \{ \omega_{\alpha}(\mathbf{k}) b_{\alpha}^+(\mathbf{k}) b_{\alpha}(\mathbf{k}) + \omega_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b_{\alpha}^+(\mathbf{k} + \mathbf{q}) b_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
&+ \omega_{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) b_{\alpha}^+(\mathbf{k} - \mathbf{q}) b_{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \\
&+ Q_{\alpha}^+(\mathbf{k}) [b_{\alpha}^+(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + b_{\alpha}(-\mathbf{k} - \mathbf{q})] [b_{\alpha}(\mathbf{k}) + b_{\alpha}^+(-\mathbf{k})] \\
&+ Q_{\alpha}^-(\mathbf{k}) [b_{\alpha}^+(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + b_{\alpha}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [b_{\alpha}(\mathbf{k}) + b_{\alpha}^+(-\mathbf{k})] \\
&+ \Delta_{\alpha}^+(\mathbf{k}) [b_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k} - \mathbf{q})] [b_{\alpha}^+(\mathbf{k}) - b_{\alpha}(-\mathbf{k})] \\
&+ \Delta_{\alpha}^-(\mathbf{k}) [b_{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [b_{\alpha}^+(\mathbf{k}) - b_{\alpha}(-\mathbf{k})] \} \\
&+ \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{\mathbf{k}} \{ I_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) [b_{\alpha}(\mathbf{k}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k})] [b_{\beta}^+(\mathbf{k}) - b_{\beta}(-\mathbf{k})] \\
&+ I_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [b_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k} - \mathbf{q})] [b_{\beta}^+(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - b_{\beta}(-\mathbf{k} - \mathbf{q})] \\
&+ I_{\alpha\beta}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) [b_{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] [b_{\beta}^+(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - b_{\beta}(-\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\
&+ I_{\alpha\beta}^+(\mathbf{k}) [b_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k} - \mathbf{q})] [b_{\beta}^+(\mathbf{k}) - b_{\beta}(-\mathbf{k})] \}
\end{aligned}$$

$$+ I_{\alpha\beta}^-(\mathbf{k})[b_{\alpha}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - b_{\alpha}^*(-\mathbf{k}+\mathbf{q})][b_{\beta}^+(\mathbf{k}) - b_{\beta}(-\mathbf{k})]\}, \quad (11)$$

其中求和限于第一布里渊区。各系数定义为

$$\begin{aligned} \omega_{\alpha}^2(\mathbf{k}) &= \omega_{\alpha}^2(-\mathbf{k}) = [(c_{11}^0 - c_{44}^0)k_{\alpha}^2 + c_{44}^0 k^2]/\rho_0, \\ \mathcal{Q}_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{k}) &= \mathcal{Q}_{\alpha}^{\mp}(-\mathbf{k}) = \mathcal{Q}_{\alpha}^{\mp}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) = \frac{\lambda \Delta \rho}{4\rho_0} \sqrt{\omega_{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}, \\ \Delta_{\alpha}^{\pm}(\mathbf{k}) &= \Delta_{\alpha}^{\mp}(-\mathbf{k}) = \Delta_{\alpha}^{\mp}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \\ &= [(\Delta c_{11} - \Delta c_{44})k_{\alpha}(k_{\alpha} \pm q_{\alpha}) + \Delta c_{44} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{k} \pm \mathbf{q})]/\sqrt{\omega_{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})\omega_{\alpha}(\mathbf{k})}, \\ I_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= I_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) = I_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) = I_{\beta\alpha}(-\mathbf{k}) = \frac{(c_{12}^0 + c_{44}^0)k_{\alpha}k_{\beta}}{4\rho_0 \sqrt{\omega_{\alpha}(\mathbf{k})\omega_{\beta}(\mathbf{k})}}, \\ I_{\alpha\beta}^{\pm}(\mathbf{k}) &= I_{\alpha\beta}^{\mp}(-\mathbf{k}) = I_{\beta\alpha}^{\mp}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \\ &= \frac{\lambda}{4\rho_0} [\Delta c_{12}(k_{\alpha} \pm q_{\alpha})k_{\beta} + \Delta c_{44}(k_{\beta} \pm q_{\beta})k_{\alpha}]/\sqrt{\omega_{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})\omega_{\beta}(\mathbf{k})}, \\ \omega_{\alpha}^i(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) &= [(c_{11}^0 - c_{44}^0)(k_{\alpha} \pm q_{\alpha})^2 + c_{44}^0 |\mathbf{k} \pm \mathbf{q}|^2]/\rho_0, \\ I_{\alpha\beta}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) &= \frac{1}{4\rho_0} [(c_{12}^0 + c_{44}^0)(k_{\alpha} \pm q_{\alpha})(k_{\beta} \pm q_{\beta})]/\sqrt{\omega_{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})\omega_{\beta}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})}. \quad (12) \end{aligned}$$

三、格林函数

我们采用双时格林函数理论^[13], 设算符 A 只与位移矢量 $u_{\alpha}(\mathbf{r})$ 有关, 因而 A 是由 $b_{\alpha}(\mathbf{k})$ 和 $b_{\alpha}^*(-\mathbf{k})$ 组成的算符。定义双时格林函数

$$D_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{k}, t, A) = \langle b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}, t) | A \rangle, \quad (13)$$

其中 b_{α}^{-} 就是 b_{α} , 只是为了讨论上的简便而引入的。 $b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}, t)$ 为海森堡表象中的 $b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k})$ 算符。格林函数的运动方程为

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} D_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{k}, t, A) &= \delta(t) \langle [b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}, t), A] \rangle \\ &+ \langle [b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}, t), H(t)] | A \rangle, \quad (14) \end{aligned}$$

其中 $H(t)$ 为哈密顿方程 (11) 的海森堡表象的算符。 $\langle \dots \rangle$ 表示按吉布斯正则系综进行平均。由 (11) 式求得

$$\begin{aligned} [b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}, t), H(t)] &= \mp \omega_{\alpha}(\mathbf{k}) b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}) \\ &\mp \mathcal{Q}_{\alpha}^-(\mathbf{k})[b_{\alpha}^+(-\mathbf{k}+\mathbf{q}) + b_{\alpha}(\mathbf{k}-\mathbf{q})] \mp \mathcal{Q}_{\alpha}^+(\mathbf{k})[b_{\alpha}^+(-\mathbf{k}-\mathbf{q}) \\ &+ b_{\alpha}(\mathbf{k}+\mathbf{q})] + \Delta_{\alpha}^+(\mathbf{k})[b_{\alpha}(\mathbf{k}+\mathbf{q}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k}-\mathbf{q})] \\ &+ \Delta_{\alpha}^-(\mathbf{k})[b_{\alpha}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - b_{\alpha}^+(-\mathbf{k}+\mathbf{q})] \\ &+ \sum_{\beta (\neq \alpha)} \{ 2I_{\alpha\beta}(\mathbf{k})[b_{\beta}(\mathbf{k}) - b_{\beta}^+(-\mathbf{k})] + I_{\beta\alpha}^+(\mathbf{k})[b_{\beta}(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \\ &- b_{\beta}^+(-\mathbf{k}-\mathbf{q})] + I_{\beta\alpha}^-(\mathbf{k})[b_{\beta}(\mathbf{k}-\mathbf{q}) - b_{\beta}^+(-\mathbf{k}+\mathbf{q})] \}. \quad (15) \end{aligned}$$

把运动方程 (14) 变换到能量表象, 并记 $D_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{k}) \equiv D_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{k}, E, A)$, 得到

$$D_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{2\pi \langle [b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}), A] \rangle}{E \pm \omega_{\alpha}(\mathbf{k})} + \frac{1}{E \pm \omega_{\alpha}(\mathbf{k})} \{ [\mp \mathcal{Q}_{\alpha}^-(\mathbf{k}) + \Delta_{\alpha}^-(\mathbf{k})] D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k}-\mathbf{q})$$

$$\begin{aligned}
& + [\mp Q_{\alpha}^-(\mathbf{k}) - \Delta_{\alpha}^-(\mathbf{k})]D_{+}^{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + [\mp Q_{\alpha}^+(\mathbf{k}) \\
& + \Delta_{\alpha}^+(\mathbf{k})]D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + [\mp Q_{\alpha}^+(\mathbf{k}) - \Delta_{\alpha}^+(\mathbf{k})]D_{+}^{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
& + \sum_{\beta (\neq \alpha)} [2I_{\alpha\beta}(\mathbf{k})[D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k}) - D_{+}^{\beta}(\mathbf{k})] + I_{\beta\alpha}^+(\mathbf{k})[D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - D_{+}^{\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\
& + I_{\beta\alpha}^-(\mathbf{k})[D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - D_{+}^{\beta}(\mathbf{k} - \mathbf{q})]]\}.
\end{aligned} \quad (16)$$

由于式中含有 $D(\mathbf{k} \pm \mathbf{b})$ 的项, 我们通过类似(15)式的处理得到

$$\begin{aligned}
D_{\pm}^{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = & \frac{1}{E \pm \omega_{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \{ [\mp Q_{\alpha}^- + \Delta_{\alpha}^-]D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k}) + [\mp Q_{\alpha}^+ - \Delta_{\alpha}^+]D_{+}^{\alpha}(\mathbf{k}) \\
& + \sum_{\beta (\neq \alpha)} [2I_{\alpha\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q})[D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - D_{+}^{\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q})] \\
& + I_{\alpha\beta}^+(\mathbf{k})[D_{-}^{\alpha}(\mathbf{k}) - D_{+}^{\beta}(\mathbf{k})]]\}.
\end{aligned} \quad (17)$$

将上式中 $(\mathbf{q}, Q^{\pm}, \Delta^{\pm}, I^{\pm})$ 分别换为 $(-\mathbf{q}, Q^-, \Delta^-, I^-)$, 可得到对应于 $D_{+}^{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q})$ 的表达式.

为了进一步简化符号, 我们定义 $D_{(+)}^{\alpha} = D_{-}^{\alpha} + D_{+}^{\alpha}$, $D_{(-)}^{\alpha} = D_{-}^{\alpha} - D_{+}^{\alpha}$, 并在下面的讨论中, 凡是以 $\mathbf{k}$ 为变量的量都不标出自变量. 例如, D_{+}^{α} 即为 $D_{+}^{\alpha}(\mathbf{k})$. 我们得到下列方程组:

$$\begin{aligned}
ED_{(-)}^{\alpha} - \omega_{\alpha}D_{(+)}^{\alpha} &= 2\pi(\delta_{\alpha}^- - \delta_{\alpha}^+) + 2Q_{\alpha}^-D_{(+)}^{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + 2Q_{\alpha}^+D_{(+)}^{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}), \\
ED_{(+)}^{\alpha} - \omega_{\alpha}D_{(-)}^{\alpha} &= 2\pi(\delta_{\alpha}^+ + \delta_{\alpha}^-) + 2\Delta_{\alpha}^-D_{(-)}^{\alpha}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + 2\Delta_{\alpha}^+D_{(-)}^{\alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \\
&+ \sum_{\beta (\neq \alpha)} \{4I_{\alpha\beta}D_{(-)}^{\beta} + 2I_{\beta\alpha}^+D_{(-)}^{\beta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + 2I_{\beta\alpha}^-D_{(-)}^{\beta}(\mathbf{k} - \mathbf{q})\}, \\
ED_{(-)}^{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) - \omega_{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})D_{(+)}^{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) &= 2Q_{\alpha}^{\pm}D_{(+)}^{\alpha}, \\
ED_{(+)}^{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) - \omega_{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})D_{(-)}^{\alpha}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) &= 2\Delta_{\alpha}^{\pm}D_{(-)}^{\alpha} \\
&+ \sum_{\beta (\neq \alpha)} \{4I_{\alpha\beta}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})D_{(-)}^{\beta}(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) + 2I_{\beta\alpha}^{\pm}D_{(-)}^{\beta}\},
\end{aligned} \quad (18)$$

其中 $\delta_{\alpha}^{\pm} = \langle [b_{\alpha}^{\pm}(\mp \mathbf{k}), A] \rangle$. 对于长波长弹性波, $|\mathbf{k}|$ 很小. 我们感兴趣的是 $\mathbf{k} \rightarrow 0$ 时 $E \rightarrow 0$ 的解.

四、有效弹性模量

为了求出有效弹性模量, 我们计算给定传播方向 $\mathbf{k}$ 和指定极化方向的声子谱. 由于半导体超晶格在晶体生长的 z 方向上由两种不同的介质交替排列, 原来的立方对称性遭到破坏, 体系实际上只具有四方晶体的对称性. 附录 B 中给出了四方晶体的弹性模量, 这些弹性模量正好与本文将要给出的有效弹性模量一一对应.

首先, 我们考查 $\mathbf{k} = [0, 0, 1]$ 沿 $(0, 0, 1)$ 方向极化的振动模式(简记为 $0, 0, 1$), 取 $A = b_z^+(\mathbf{k}) - b_z(-\mathbf{k})$, 则 $A^+ = b_z(\mathbf{k}) - b_z^+(-\mathbf{k})$, 格林函数为

$$\langle A^+ | A \rangle = \langle b_z(\mathbf{k}) | A \rangle - \langle b_z^+(-\mathbf{k}) | A \rangle = D_{-}^z - D_{+}^z = D_{(-)}^z. \quad (19)$$

因为长波长近似有 $k \ll q$, 可记

$$\omega^2 \equiv \omega_z^2(k) = \frac{c_{11}^0}{\rho_0} k^2, \quad \omega_0^2 \equiv \omega_z^2(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) = \frac{c_{11}^0}{\rho_0} q^2,$$

$$\tilde{Q} \equiv Q_z^\pm = \frac{\lambda \Delta \rho}{4 \rho_0} \sqrt{\frac{c_{11}^0}{\rho_0}} \sqrt{kq}, \quad \pm \tilde{\Delta} \equiv \Delta_z^\pm = \pm \frac{\lambda \Delta c_{11}}{4 \rho_0} \sqrt{\frac{\rho_0}{c_{11}^0}} \sqrt{kq}, \quad (20)$$

代入(18)式并通过(18)式中方程组的求解,得到

$$\begin{aligned} & [(E^2 - \omega^2 + 8\tilde{\Delta}^2\omega/\omega_0)(E^2 - \omega^2 + 8\tilde{Q}^2\omega/\omega_0) - 8\tilde{Q}^2E \cdot 8\tilde{\Delta}^2E/\omega_0^2] D_{-}^2, \\ & = 4\pi\omega(E^2 - \omega^2 + 8\tilde{Q}^2\omega/\omega_0) - \frac{8\tilde{Q}^2E4\pi E}{\omega_0}. \end{aligned} \quad (21)$$

由 D_{-}^2 的极点可得 $0, 0, 1$ 振动模式的能谱, 即(21)式中 D_{-}^2 的系数为零给出

$$\begin{aligned} E^2 &= k^2 c_{11}^*/\rho_0, \\ c_{11}^* &= c_{11}^0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta \rho}{\rho_0} \right)^2 \right] \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta c_{11}}{c_{11}^0} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

与附录 B 比较可知, 有效弹性模量 c_{11}^* 对应于四方晶系的 c'_{33} .

为了得到其它有效弹性模量, 类似于上面的讨论方法, 我们逐个讨论了 $[0, 0, 1](1, 0, 0)$, $1, 0, 0$, $[1, 0, 0](0, 1, 0)$, $1, 0, 1$ 和 $1, 1, 0$ 振动模式, 分别得到了对应于四方晶系的其它模量 c'_{44} , c'_{11} , c'_{66} , c'_{13} 和 c'_{12} . 加上前面得到的 c'_{33} , 这六个独立的四方晶系的弹性模量归纳为

$$\begin{aligned} c'_{11} &= c_{11}^0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta \rho}{\rho_0} \right)^2 \right] \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta c_{12}}{c_{11}^0} \right)^2 \right], \\ c'_{33} &= c_{11}^0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta \rho}{\rho_0} \right)^2 \right] \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta c_{11}}{c_{11}^0} \right)^2 \right], \\ c'_{44} &= c_{44}^0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta \rho}{\rho_0} \right)^2 \right] \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta c_{44}}{c_{44}^0} \right)^2 \right], \\ c'_{66} &= c_{44}^0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta \rho}{\rho_0} \right)^2 \right], \\ c'_{12} &= c_{12}^0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta \rho}{\rho_0} \right)^2 \right] \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta c_{12}}{c_{11}^0} \right) \left(\frac{\lambda \Delta c_{12}}{c_{12}^0} \right) \right], \\ c'_{13} &= c_{12}^0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta \rho}{\rho_0} \right)^2 \right] \cdot \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda \Delta c_{11}}{c_{11}^0} \right) \left(\frac{\lambda \Delta c_{12}}{c_{12}^0} \right) \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

(23)式在 $b = 0$ 和 $b = a$ 的极限下, $\lambda = 0$, 弹性常数 $c^0 = c + \frac{b}{a} \Delta c$, 分别退化为 c 和 $c + \Delta c$. 这正是单一介质的弹性模量, 与我们的直观想象一致. c^0 实际上是两种介质的平均弹性模量. 从(23)式可以看到各个弹性模量 c' 总是小于对应的弹性模量的平均值 c^0 .

我们想指出的是, 在(22)式中, 我们舍弃了方程(21)的另一组解:

$$E^2 = k^2 c_{11}^0/\rho_0. \quad (24)$$

这是因为, 我们在讨论 $[0, 0, 1](1, 0, 0)$ 和 $[1, 0, 0](0, 0, 1)$ 两种模式时, 如果取(24)式形式的解, 所得出的两个 c_{11}^* 不相等. 而由四方对称性, 这两支模式对应于同一个弹性模量 c'_{44} . 因此, 我们只取满足对称性要求的解.

附 录 A

根据傅氏变换的定义

$$\begin{aligned} u_{\alpha}(\mathbf{r}) &= V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} u_{\alpha}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ u_{\alpha}^{*}(\mathbf{r}) &= V^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} u_{\alpha}^{*}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

我们得到 $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ 及 $\varepsilon_{\alpha\beta}^{*}(\mathbf{r})$ 的傅氏变换

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) &= \frac{-i}{2} \sum_{\mathbf{k}} [k_{\alpha} u_{\beta}(\mathbf{k}) + k_{\beta} u_{\alpha}(\mathbf{k})] V^{-1/2} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ \varepsilon_{\alpha\beta}^{*}(\mathbf{r}) &= \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{k}} [k_{\alpha} u_{\beta}^{*}(\mathbf{k}) + k_{\beta} u_{\alpha}^{*}(\mathbf{k})] V^{-1/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

将(A.1)和(A.2)式代入(5b)和(6)式,并注意到

$$V^{-1} \int d^3\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (\text{A.3})$$

可得到(7)式.

附 录 B

四方晶系弹性模量的矩阵元为^[14]

$$\begin{bmatrix} c'_{11} & c'_{12} & c'_{13} & & & \\ c'_{12} & c'_{11} & c'_{13} & & & \\ c'_{13} & c'_{13} & c'_{33} & & & \\ & & & c'_{44} & 0 & 0 \\ & & & 0 & c'_{44} & 0 \\ & & & 0 & 0 & c'_{66} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

其中为了区别于立方晶系的 c_{11} 等,四方晶系的弹性模量均记为 c . 利用克利斯托夫模量 Γ_{ij} ,对四方晶系有

$$\begin{aligned} \Gamma_{11} &= l^2 c'_{11} + m^2 c'_{66} + n^2 c'_{44}, & \Gamma_{12} &= \Gamma_{21} = lm(c'_{12} + c'_{66}), \\ \Gamma_{13} &= \Gamma_{31} = nl(c'_{13} + c'_{44}), & \Gamma_{23} &= \Gamma_{32} = mn(c'_{44} + c'_{13}), \\ \Gamma_{22} &= l^2 c'_{66} + m^2 c'_{11} + n^2 c'_{44}, & \Gamma_{33} &= (l^2 + m^2)c'_{44} + n^2 c'_{33}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

所以久期方程为

$$\begin{vmatrix} l^2 c'_{11} + m^2 c'_{66} + n^2 c'_{44} - c & lm(c'_{12} + c'_{66}) & nl(c'_{13} + c'_{44}) \\ lm(c'_{12} + c'_{66}) & l^2 c'_{66} + m^2 c'_{11} + n^2 c'_{44} - c & mn(c'_{44} + c'_{13}) \\ ln(c'_{13} + c'_{44}) & mn(c'_{44} + c'_{13}) & (l^2 + m^2)c'_{44} + n^2 c'_{33} - c \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{B.3})$$

其中 $[l, m, n]$ 表示振动模式的传播方向.

首先讨论 $\mathbf{k}$ 为 $[0, 0, 1]$ 的弹性波. 这时 $l = m = 0, n = 1$, 久期方程约化为

$$\begin{vmatrix} c'_{44} - c & & \\ & c'_{44} - c & \\ & & c'_{33} - c \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{B.4})$$

c 有三个根. c'_{44} 对应于 $(1, 0, 0)$ 和 $(0, 1, 0)$ 方向的极化, c'_{33} 为 $(0, 0, 1)$ 方向的极化.

当 $\mathbf{k} = [1, 0, 0]$ 时, $l = 1, m = n = 0$, 可得久期方程为

$$\begin{vmatrix} c'_{11} - c & & \\ & c'_{66} - c & \\ & & c'_{44} - c \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{B.5})$$

沿 $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ 和 $(0, 0, 1)$ 方向极化的弹性模量为 c'_{11} , c'_{66} 和 c'_{44} . 用类似的方法考虑其它给定 $\mathbf{k}$ 的情况, 可得到 c'_{12} 和 c'_{13} .

- [1] I. K. Schuller, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 1597.
- [2] W. M. C. Yang, T. Tsakalakos & J. E. Hilliard, *J. Appl. Phys.*, **48**(1977), 876.
- [3] E. M. Gyorgy *et al.*, *Rev. Lett.*, **45**(1980), 57.
- [4] L. R. Testardi *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **52**(1981), 510.
- [5] T. Koehler, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1753.
- [6] T. Jarlborg & A. J. Freeman, *Rev. Lett.*, **45**(1980), 653.
- [7] B. J. Thaler, J. B. Ketterson & J. E. Hilliard, *Rev. Lett.*, **41**(1978), 336.
- [8] Das Sarma & J. J. Quinn, *Phys. Rev.*, **B25**(1982), 7603.
- [9] W. L. Bloss, *Solid State Commun.*, **44**(1982), 363.
- [10] A. Tselis & J. J. Quinn, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 3318.
- [11] J. K. Jain & P. B. Allen, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 997.
- [12] A. L. Fetter, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **88**(1974), 1.
- [13] 李正中, 固体理论, 高等教育出版社, (1985), 39 页; 453 页.
- [14] 方俊鑫, 陆 栋, 固体物理学, 上海科学技术出版社, (1980), 87 页.

EFFECTIVE ELASTIC CONSTANT OF THE SEMICONDUCTOR SUPERLATTICE

XIONG XIAO-MING TAO RUI-BAO

(Department of Physics, Fudan University, Shanghai)

ABSTRACT

The effective elastic constant of the GaAs-GaAlAs kind semiconductor superlattice has been obtained by means of the method of Green's function in the long wave approximation. The results show that the effective elastic constant is not greater than that of either kind of the matter which are the components of the superlattice. In the limit of $b=0$ and $b=a$, where a is the period of the superlattice and b is the width of one of the component, the result reduces to the elastic constant of one single medium.