

# 超晶格中界面不平整对等离子 振子模的影响

史 杭                      蔡 建 华

(南京大学固体物理研究所) (上海交通大学凝聚态物理研究所)

1987 年 6 月 1 日收到

## 提      要

本文讨论超晶格中界面不平整对等离子振子 (Plasmon) 模性质的影响, 得到了等离子振子模的频率漂移、平均自由程及寿命。

## 一、模      型

表面的不平整对固体表面电磁波模的影响已经有一些作者讨论过<sup>[1-6]</sup>。这里研究界面的不平整性的影响。由于技术上的限制, 即使是最精密地制备的超晶格样品, 这种界面的不平整性总是存在的。如图 1 所示, 第  $i$  个不平整的界面可以用  $z - z_i = \zeta_i(x, y)$  来代表, 这里  $\zeta_i$  是自平均  $z$  坐标  $z_i$  的偏离。假定  $|\zeta_i| \ll d_1, d_2$  (见图 1), 它们是随机函数, 并且各个界面的不平整性之间没有关联, 于是无论  $i$  是多少, 每个  $\zeta_i$  独立地服从同一个分布  $\zeta$ 。自然

$$\langle \zeta(x, y) \rangle = 0.$$

$\langle \dots \rangle$  表示对  $\zeta$  的分布的平均。令  $[\mathbf{r}_{ii} = (x, y)]$

$$\langle \zeta(x, y) \zeta(x', y') \rangle = \delta^2 W(\mathbf{r}_{ii} - \mathbf{r}'_{ii}), \quad (1)$$

其中

$$\delta^2 = \langle \zeta^2(\mathbf{r}_{ii}) \rangle. \quad (2)$$

显然  $W(0) = 1$ 。以下假定相关函数  $W(\mathbf{r}_{ii})$  有  
高斯形式<sup>[7]</sup>

$$W(\mathbf{r}_{ii}) = \exp(-r_{ii}^2/\sigma^2), \quad (3)$$

$\sigma$  是横向相关长度。如上所述, 我们假定各个界面有相同的  $\delta$  和  $\sigma$ ,  $\delta$  的大小在几个埃到几十个埃, 而  $\sigma$  则大约为几百个埃。

Rahman 和 Maradudin<sup>[8]</sup> 在研究于粗糙界面附近的一个电荷的象电荷的虚电势时, 曾得到一个有用的结论: 准确到  $\delta^2$ , 这个不平整的界面可以用一个厚度为  $L$  的薄层代替。如图 2, 薄层的位置在  $-\frac{2}{3}L < z < \frac{1}{3}L$ ,  $L = 3\pi^{1/2} \frac{\delta^2}{\sigma}$ , 薄层的介电常数则是界面两侧介电常数的平均值:  $\epsilon_s = \frac{1}{2}(\epsilon_1 + \epsilon_2)$ 。这个近似仅在计算静电势时成立。假如

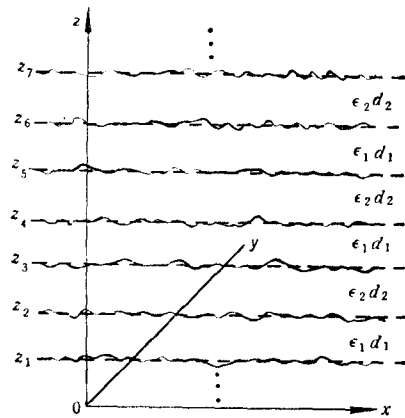


图 1

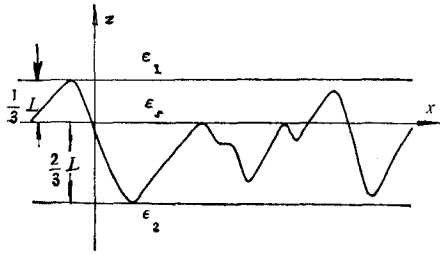


图 2

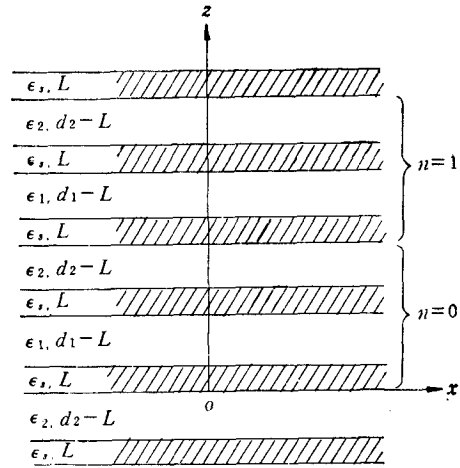


图 3

采用这个近似,则有不平整界面的超晶格就可由图 3 表示的结构所代替.

## 二、计 算

不失一般性,可设电磁模沿  $x$  轴传播. 令静电势

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi(z) \exp(ikx - i\omega t) \quad (4)$$

则  $\phi(z)$  满足

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} - k^2 \right) \phi(z) = 0.$$

因此,一般地

$$\phi(z) = A_+ e^{kz} + A_- e^{-kz}. \quad (5)$$

由 Bloch 定理

$$\phi(nl + z) = e^{iqnl} \phi(z), \quad (6)$$

$n$  是整数,  $l = d_1 + d_2$ , 所以

$$\phi(z) = \begin{cases} e^{iqnl} (A_+ e^{k(z-nl)} + A_- e^{-k(z-nl)}), & nl \leq z \leq nl + L, \\ e^{iqnl} (B_+ e^{k(z-nl-L)} + B_- e^{-k(z-nl-L)}), & nl + L \leq z \leq nl + d_1, \\ e^{iqnl} (C_+ e^{k(z-nl-d_1)} + C_- e^{-k(z-nl-d_1)}), & nl + d_1 \leq z \leq nl + d_1 + L, \\ e^{iqnl} (D_+ e^{k(z-nl-d_1+L)} + D_- e^{-k(z-nl-d_1-L)}), & nl + d_1 + L \leq z \leq (n+1)l. \end{cases} \quad (7)$$

由  $\phi(z)$  及  $\frac{d\phi(z)}{dz}$  在各界面上的连续性, 可以得到八个方程, 用以确定  $A_{\pm}$ ,  $B_{\pm}$ ,  $C_{\pm}$  及  $D_{\pm}$ , 消去  $A_{\pm}$ ,  $B_{\pm}$ ,  $C_{\pm}$  后, 有

$$D_+ \left\{ \left( 1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_f} \right) \left( 1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_f} \right) (e^{kd_1} \cdot e^{-iqL} - e^{-kd_1}) - \left( 1 - \frac{\epsilon_2}{\epsilon_f} \right) \left( 1 - \frac{\epsilon_1}{\epsilon_f} \right) \right\}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot (e^{kd_2} \cdot e^{-iqL} - e^{2kL} \cdot e^{-kd_1}) \Big\} = D_- \left\{ \left(1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right) \left(1 - \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \right. \\
& \cdot (e^{-kd_2} \cdot e^{-iqL} - e^{-kd_1} \cdot e^{2kL}) \\
& \left. - \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \left(1 - \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right) (e^{-kd_2} \cdot e^{-iqL} \cdot e^{2kL} - e^{-kd_1}) \right\}, \\
D_+ & \left\{ \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \left(1 - \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right) (e^{kd_2} \cdot e^{-iqL} \cdot e^{-2kL} - e^{kd_1}) \right. \\
& \left. - \left(1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right) \left(1 - \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) (e^{kd_2} \cdot e^{iqL} - e^{kd_1} \cdot e^{-2kL}) \right\} \\
& = D_- \left\{ \left(1 - \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right) \left(1 - \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) (e^{-kd_2} \cdot e^{-iqL} \cdot e^{2kL} - e^{kd_1} \cdot e^{-2kL}) \right. \\
& \left. - \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}\right) \left(1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right) (e^{-kd_2} \cdot e^{-iqL} - e^{kd_1}) \right\}.
\end{aligned}$$

由于  $L \approx \delta^2$ , 准确到  $O(\delta^2)$ , 可将上面两式中的  $e^{\pm 2kL}$  展开, 从而得到下面的色散关系:

$$\begin{aligned}
& \cosh(kd_1) \cosh(kd_2) + \frac{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}{2\epsilon_1\epsilon_2} \sinh(kd_1) \sinh(kd_2) - \cos(qL) \\
& = kL \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2}{4\epsilon_1\epsilon_2} \left\{ i \sin(qL) + \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} \sinh[k(d_2 - d_1)] \right\}. \quad (8)
\end{aligned}$$

若  $\delta^2 = 0$  (理想平整界面情形), 上式成为 Camley 等人<sup>[9]</sup>得到的结果.

从(8)式可知, 由于存在不平整的界面, 即使不计介电阻尼, 也会使等离振子存有限寿命. 这在物理上是明显的. 因等离振子平行于界面传播, 必定受到粗糙界面的散射. 为了集中注意界面的不平整对等离振子的影响, 我们将假定不存在介电阻尼, 即  $\epsilon_1, \epsilon_2$  均为实数, 并且  $\epsilon_1$  为常数,  $\epsilon_2 = \epsilon_2(\omega)$ . 以  $L = 3\pi^{1/2}\delta^2/\sigma$  代入, 并令

$$F(k, \omega) \equiv \cosh(kd_2) \cosh(kd_1) + \frac{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}{2\epsilon_1\epsilon_2} \sinh(kd_2) \sinh(kd_1) - \cos(qL) \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
G & = G^{(1)} + iG^{(2)} \\
& \equiv 3\pi^{1/2} \frac{\delta^2}{\sigma} k \frac{(\epsilon_2 - \epsilon_1)^2}{4\epsilon_1\epsilon_2} \left\{ i \sin(qL) + \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 + \epsilon_1} \sinh[k(d_2 - d_1)] \right\}. \quad (10)
\end{aligned}$$

在  $F(k, \omega)$  的零点  $F[k, \omega_0(k)] = 0$  附近展开  $\omega(k)$

$$\omega(k) = \omega_0(k) + G[k, \omega_0(k)] \left\{ \left[ \frac{d}{d\omega} F(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_0} \right\}^{-1} \quad (11)$$

或

$$\omega(k) = \omega_0(k) + \Delta(k) - i\Gamma(k), \quad (12)$$

其中

$$\Delta(k) = \delta^2 G^{(1)}(k, \omega_0) \left\{ \left[ \frac{d}{d\omega} F(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_0} \right\}^{-1}, \quad (13)$$

$$\Gamma(k) = -\delta^2 G^{(2)}(k, \omega_0) \left\{ \left[ \frac{d}{d\omega} F(k, \omega) \right]_{\omega=\omega_0} \right\}^{-1}. \quad (14)$$

将  $F, G^{(1)}$  和  $G^{(2)}$  代入, 得到

$$\Delta(k) = \frac{3}{2} \pi^{1/2} \frac{\delta^2}{\sigma} k \frac{\epsilon_2(\omega_0)}{\epsilon_2'(\omega_0)} \left( \frac{\epsilon_2(\omega_0) - \epsilon_1}{\epsilon_2(\omega_0) + \epsilon_1} \right)^2 \frac{\sinh [k(d_2 - d_1)]}{\sinh(kd_2) \sinh(kd_1)}, \quad (15)$$

$$\Gamma(k) = \frac{3}{2} \pi^{1/2} \frac{\delta^2}{\sigma} k \frac{\epsilon_2(\omega_0)}{\epsilon_1(\omega_0)} \left( \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2(\omega_0)}{\epsilon_1 + \epsilon_2(\omega_0)} \right) \frac{\sin(ql)}{\sinh(kd_2) \sinh(kd_1)}, \quad (16)$$

式中  $\epsilon_2'(\omega) = \frac{d}{d\omega} \epsilon_2(\omega)$ ,  $\Delta(k)$  是界面不平整造成的频率漂移, 而  $(2|\Gamma|)^{-1}$  是等离振子的寿命。

为了求得自由程  $\lambda$ , 先要计算群速,  $v(k) = \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{\omega_0}$ , 由  $F$  的表达式, 得到

$$v(k) = \left[ \left( \frac{\epsilon_1^2 - \epsilon_2^2}{2\epsilon_1\epsilon_2} \right) \frac{\epsilon_2'(\omega)}{\epsilon_2(\omega)} \sinh(kd_2) \sinh(kd_1) \right]^{-1} \left[ \sinh(kd_1) \cosh(kd_2) \right. \\ \left. \cdot \left( d_1 + d_2 \frac{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}{2\epsilon_1\epsilon_2} \right) + \cosh(kd_1) \sinh(kd_2) \left( d_2 + d_1 \frac{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}{2\epsilon_1\epsilon_2} \right) \right]. \quad (17)$$

因此自由程的倒数为

$$\lambda^{-1}(k) = \frac{v}{2\Gamma} \\ = \{ \sinh(kd_1) \cosh(kd_2) [2\epsilon_1\epsilon_2(\omega_0)d_1 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2(\omega_0))d_2] \\ + \cosh(kd_1) \sinh(kd_2) [2\epsilon_1\epsilon_2(\omega_0)d_2 + (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2(\omega_0))d_1] \}^{-1} \\ \cdot 3\pi^{1/2} \frac{\delta^2}{\sigma} k [\epsilon_1 - \epsilon_2(\omega_0)]^2 \sin(ql). \quad (18)$$

### 三、数值结果

为了获得数值结果, 假定  $\epsilon_1 = 1$ ,  $d_2 = 2d_1 = 1000 \text{ \AA}$ ,  $\delta = 10 \text{ \AA}$ ,  $\sigma = 200 \text{ \AA}$ , 这样的

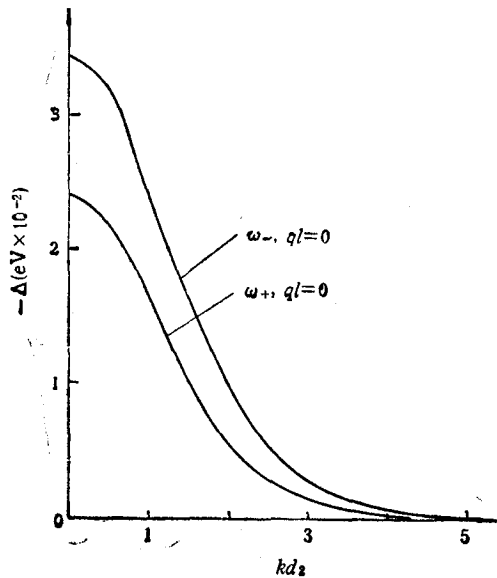


图 4

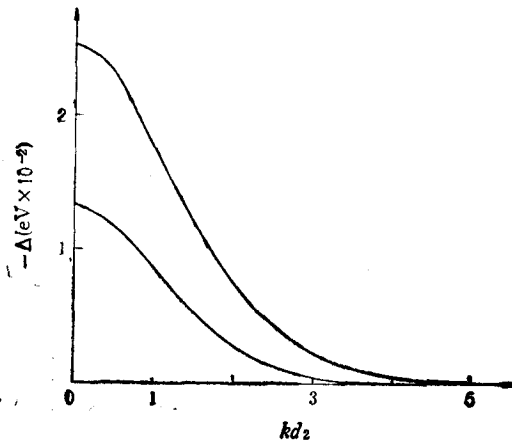


图 5

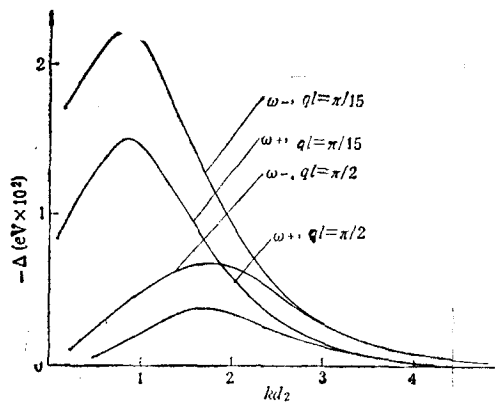


图 6

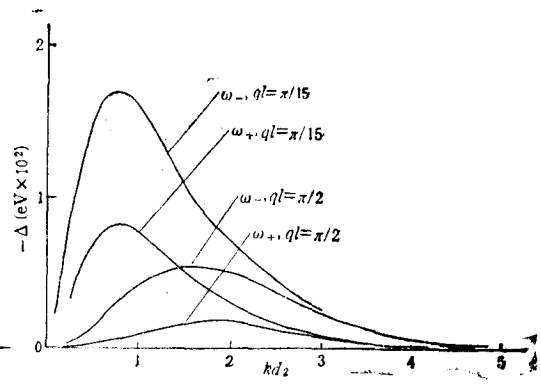


图 7

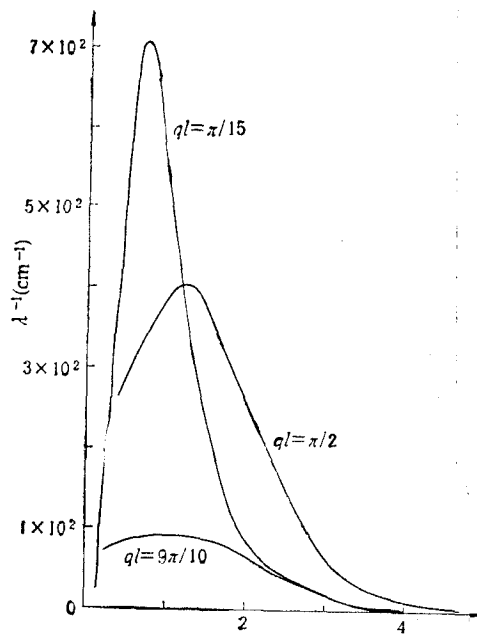


图 8

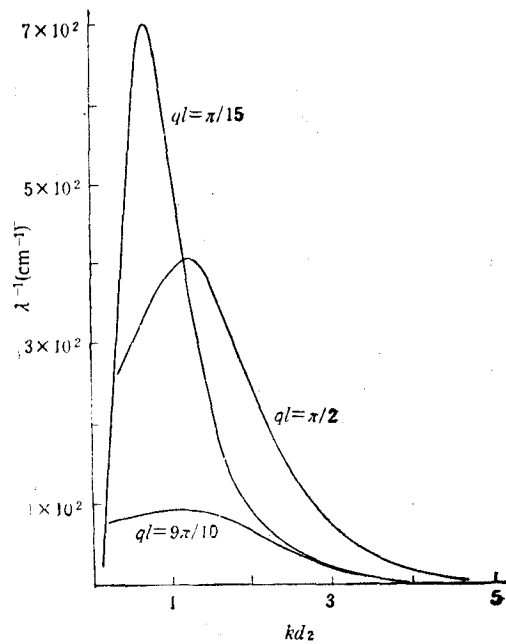


图 9

$\delta$  和  $\sigma$  的数值相当于非常光滑的铝表面的情形<sup>[10]</sup>。关于  $\epsilon_2(\omega)$ ，我们分别计算金属和半导体两种情形。对于金属铝，取

$$\epsilon_2(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad h\omega_p = 15\text{eV}, \quad (19)$$

$\omega_p$  是等离子子频率。对极性半导体，取

$$\epsilon_2(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 - \omega^2/\omega_0^2}, \quad \epsilon_0 = 5.9, \quad \epsilon_\infty = 2.25, \quad \omega_0 = 3.1 \times 10^{13}\text{s}^{-1}. \quad (20)$$

相当于 NaCl 的情形。

从(15)式可见，即使在带边  $ql = 0, \pi$  处，也存在频率漂移，但由(16)及(18)式，在带

边处,  $\Gamma$  和  $\lambda^{-1}$  都是零。图 4 和图 5 分别绘出了  $ql = 0$  时金属和半导体情形频率漂移随  $kd_2$  的变化。由图可见  $\Delta(k)$  总是负的, 在  $ql \neq 0$  时, 也是如此, 见图 6 和图 7。此四图中,  $\omega_{\pm}$  分别是频带的上半支和下半支的频率, 由图可见, 频带下半支的频率漂移比上半支的大。比较图 4 与图 5 及图 6 与图 7, 可知金属超晶格中等离振子的频率漂移大于半导体超晶格中的。由图 6 和图 7 知道, 在  $ql \approx 0$  时, 频率漂移随  $kd_2$  的变化总存在一个峰, 表明对于一定的  $ql$ , 一定存在一个  $kd_2$  值使  $\Delta$  为最大。

图 8 和图 9 分别绘出金属和半导体超晶格中  $\lambda^{-1}$  与  $kd_2$  的关系。频带上、下半支的

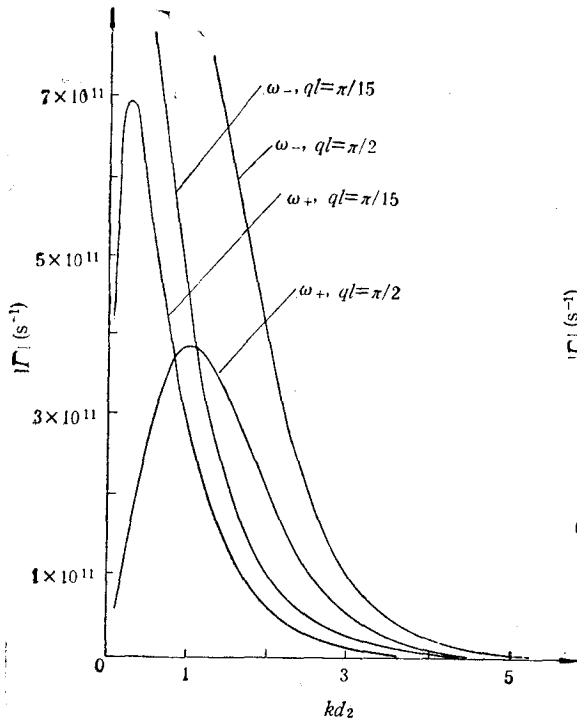


图 10

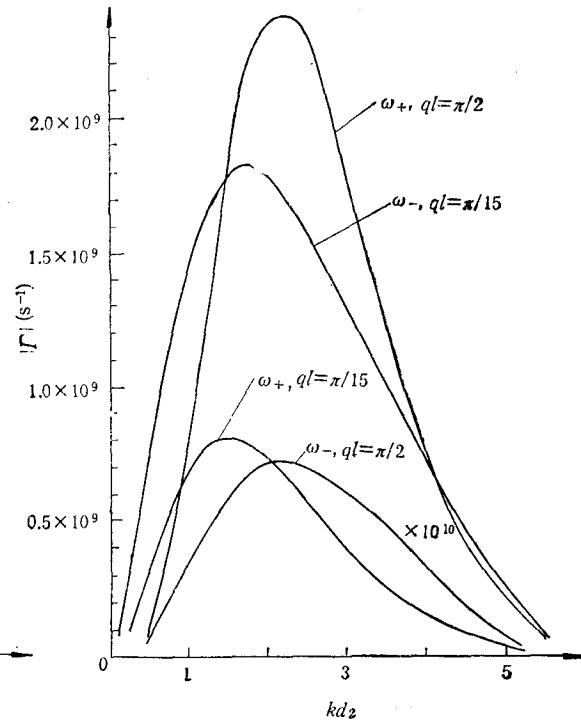


图 11

$\lambda^{-1}$  几乎没有差别, 图中用一条曲线表示。由图可见, 对于一定的  $ql$ ,  $\lambda^{-1}$  也有一个峰, 它随着  $ql$  减小而变得越来越高而窄。  $\lambda$  的数量级是  $10^5$  到  $10^6 \text{ \AA}$ , 因此, 如果界面相当平整, 则等离振子还是“很自由”的。

图 10 和图 11 分别示出金属和半导体情形,  $\Gamma$  随  $kd_2$  变化的曲线。由图可见, 也存在峰值, 而在半导体超晶格中, 等离振子的寿命要比在金属超晶格中大两个数量级。

由于图 3 表示的模型仅适用于计算静电势, 故不能推广到包括推迟效应在内。但从以上计算的讨论可以看到界面的不平整所造成影响的一般特征。

### 参 考 文 献

- [1] A. A. Maradudin and D. L. Mills, *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 1392.  
 [2] D. L. Mills, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 4036.

- [ 3 ] E. Kroger and E. Kretschmann, *Phys. Stat. Sol.*, **76**(1976), 515.  
[ 4 ] F. Toigo, A. Marvin, V. Ceui and N. R. Hill, *Phys. Rev.*, **B15**(1977), 5618.  
[ 5 ] 史杭、蔡建华, 物理学报, 待发表.  
[ 6 ] A. A. Maradudin, in *Surface Polaritons*, edited by V. M. Agranovich and D. L. Mills, (1982), p. 405.  
[ 7 ] J. M. Elson and R. H. Ritchie, *Phys. Rev.*, **B4**(1971), 4129.  
[ 8 ] T. S. Rahman and A. A. Maradudin, *Phys. Rev.*, **B21**(1980), 504.  
[ 9 ] R. E. Camley and D. L. Mills, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 1695.  
[ 10 ] D. L. Mills and A. A. Maradudin, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 2943.

## EFFECT OF INTERFACIAL ROUGHNESS ON THE PLASMON MODE IN SUPERLATTICES

SHI HANG

*(Institute of Solid State Physics, Nanjing University)*

CAI JIAN-HUA

*(Institute of Condensed Matter Physics, Shanghai Jiaotong University)*

### ABSTRACT

The effect of interfacial roughness on the plasmon mode in superlattices is discussed. The corresponding frequency shift, mean free path and life time of the plasmon mode have been derived.