

晶格热振动对准二维强耦合极化子 有效质量的影响^{*}

额尔敦朝鲁^{1)†} 李树深²⁾ 肖景林³⁾

¹⁾ 河北科技师范学院数理系, 秦皇岛 066004)

²⁾ 中国科学院半导体研究所, 半导体超晶格国家重点实验室, 北京 100083)

³⁾ 内蒙古民族大学物理与机电学院, 通辽 028043)

(2004 年 10 月 13 日收到, 2004 年 11 月 22 日收到修改稿)

采用 Tokuda 改变的线性组合算符法和改进的 LLP 变分法, 研究了晶格热振动对无限势垒量子阱中电子与界面光学声子强耦合、与体纵光学声子弱耦合系统的影响, 推导出作为阱宽和温度函数的极化子有效质量的表达式. 尤其得到了量子阱中极化子的振动频率及其随阱宽和温度变化的规律. 对 KI/AgCl/KI 量子阱进行了数值计算. 结果表明, 极化子的振动频率和有效质量随阱宽的增加而减小、随温度的升高而减小, 但不同支声子与电子相互作用对极化子的振动频率和有效质量的贡献以及它们随阱宽和温度的变化情况大不相同.

关键词: 量子阱, 强耦合极化子, 振动频率, 有效质量, 温度依赖性

PACC: 6320K, 7138

1. 引 言

20 世纪 80 年代报道了一些关于无限或半无限晶体中极化子有效质量的温度依赖性的新的研究工作. 在这些理论研究中, 由于采用不同的电子-声子相互作用机理和不同的理论近似, 提供了两种完全相反的结论. Yokota^[1]用 Hartree 近似得出极化子的有效质量随温度的升高而减小, Futtor^[2]利用 Gurari 变分法导出了相反的结果. 后来, 有不少的理论工作^[3-5]也得到了与 Yokota 相同的结果, 而另一些工作^[6-8]则得到了极化子的有效质量随温度的升高而增加的结论. 对不同的物质, 实验结果也表明了相反的变化趋势^[9].

近年来, 随着材料生长技术的发展, 处于量子阱和超晶格异质结等微结构中的局域电子问题备受各国物理学家所关注, 声子对局域电子的影响也引起人们日益重视. Morri 等人^[10]和 Liang 等人^[11]分别各自独立的导出了量子阱中晶格振动的光学极化模以及电子与光学声子相互作用的哈密顿量. 他们发现, 在量子阱结构中, 除了众所周知的束缚体纵光学

(longitudinal optical, LO) 声子模外, 还存在四支界面光学(interface optical, IO) 声子模, 这些模的本征矢和电子-声子耦合函数被局域在量子阱的界面附近, 并且对极化子的性质产生影响. Sarma 等人^[12]研究过无限势垒量子阱中体纵光学声子对电子结合能及有效质量的影响, Comas 等人^[13]计算过与体纵光学声子相互作用的电子结合能及有效质量, Hai 等人^[14]对三种不同势阱研究了量子阱中极化子的能量及有效质量. Zheng 等人^[15]采用 LLP 变分法研究了有限深量子阱中极化子的能量和有效质量. Shi 等人^[16]采用二阶微扰论和 LLP 变分法研究了非对称半导体量子阱中极化子的能量和有效质量. 然而多数工作仅限于讨论零温极限和电子-声子弱中耦合情形. 它们对 III-V 族化合物材料无疑是正确的.

随着分子束外延等高新技术的发展, 近年来, II-VI 族化合物材料已被广泛注意. 一般而言, 这些材料中的电子-声子耦合常数比 III-V 族化合物材料中的电子-声子耦合常数大一个数量级. 对于 I-III 族的极性晶体, 其电子-声子之间的耦合更强, 以至弱中耦合理论不再适用. 随着技术的进步, 这些新材料在光电子器件等方面有潜在的应用价值, 越来

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10174076), 国家重点基础研究专项经费(批准号:G2001CB309500), 内蒙古自然科学基金(批准号:200208020110) 和内蒙古高校重大科研项目基金(批准号: NJ02074) 资助的课题.

[†] E-mail: zmlnjtw@public.hh.nm.cn.

越引起人们的兴趣. 对于体极化子, 弱中耦合理论适用于电子-体纵光学声子耦合常数小于 6 的情形^[17], 而对于表面或界面极化子这种限制约为 2.5^[18], 所以当电子与表面或界面光学声子的耦合常数大于 2.5 时, 就必须采用强耦合理论.

20 世纪 70 年代, Huybrechts^[19]曾提出一种关于强耦合极化子的线性组合算符法, 将强耦合极化子描述为一个在抛物势阱中谐振的准粒子, 其振动频率作为变分参数由极值条件确定. 这种方法对强耦合问题的处理与其他人的结果^[20-21]一致, 而且具有简单直观的优点. Tokuda 及其合作者为强耦合极化子理论的发展作了大量的工作, 特别是他在 Huybrechts 理论的基础上, 又对动量算符加上了另一个变分参量^[22], 使这一理论不仅能够计算强耦合极化子的基态能量, 而且还能计算极化子的有效质量.

本文在 Huybrechts 关于强耦合极化子模型的基础上, 采用 Tokuda 改进的线性组合算符和改进的 LLP 变分法, 研究了晶格热振动对无限势垒量子阱中电子与 IO 声子强耦合、与体 LO 声子弱耦合系统的影响, 推导出作为阱宽和温度函数的极化子有效质量的表达式. 尤其得到了量子阱中极化子的振动频率及其随阱宽和温度变化的规律. 对 KI/AgCl/KI 量子阱进行了数值计算, 结果表明, 极化子的振动频率和有效质量随阱宽的增加而减小、随温度的升高而减小, 但不同支声子与电子相互作用对极化子的振动频率和有效质量的贡献以及它们随阱宽和温度的变化情况大不相同.

2. 理论与模型

考虑被限制在一个无限高势垒量子阱中的电子, 设由两种极性介质组成一个对称量子阱, 其中厚度为 $2d$ 的极性介质作为阱材料“1”, 垒材料则为两边对称的无限大极性介质“2”, 如图 1 所示. 在有效质量近似下, 电子-晶格系统的哈密顿量可以写成^[10,11]

$$H = H_e + H_{LO} + H_{e-LO} + H_{IO} + H_{e-IO}, \quad (1)$$

式中第一项为电子的能量

$$H_e = \frac{P_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + \frac{P_z^2}{2m_z} + U(z), \quad (2)$$

其中

$$U(z) = \begin{cases} \infty, & |z| > d, \\ 0, & |z| \leq d, \end{cases} \quad (3)$$

这里 $\mathbf{P} = (P_{\parallel}, P_z)$ 和 $m^* = (m_{\parallel}, m_z)$ 分别表示电子

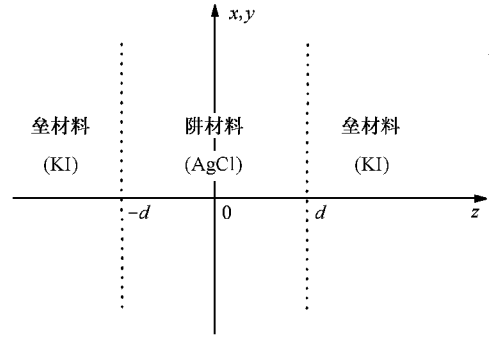


图 1 量子阱的几何形状

的动量和带质量. (1) 式中第二和第三项分别描写局域 LO 声子场和电子-LO 声子相互作用能

$$H_{LO} = \sum_{kmp} \hbar\omega_{L1} a_{kmp}^+ a_{kmp}, \quad (4)$$

$$H_{e-LO} = \sum_{kmp} [V_{kmp}(z) e^{ik \cdot \mathbf{r}} a_{kmp} + \text{H. c.}], \quad (5)$$

其中

$$V_{kmp}(z) = \frac{iB}{(k^2 + k_m^2)^{1/2}} \text{cst}(k_m z), \quad (6)$$

$$B = \sqrt{2} \left(\frac{4\pi\alpha_{L1}}{\Omega} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{2m_b\omega_{L1}} \right)^{1/4} \hbar\omega_{L1}, \quad (7)$$

$$k_m = \frac{m\pi}{2d}, \quad (8)$$

$$\Omega = S2d, \quad (9)$$

$$\text{cst}(k_m z) = \begin{cases} \cos(k_m z), & m = 1, 3, 5, \dots, \\ \sin(k_m z), & m = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (10)$$

这里 a_{kmp}^+ (a_{kmp}) 是频率为 ω_{L1} , 波矢为 (\mathbf{k}, k_m) , 宇称为 p 的 LO 声子的产生(湮没)算符. $\mathbf{r} = (\mathbf{r}, z)$ 是电子的位矢, p 为 $z = 0$ 平面镜像对称的宇称, 取“+”或“-”, 取“+”时, m 取奇数, p 取“-”时, m 取偶数. 波矢 $k_z = m\pi/2d$, $m = 1, 2, \dots, D/2$, $D = 2d/a$, a 为晶格常数. Ω 和 S 分别表示量子阱的体积和界面面积.

$$\begin{aligned} \alpha_{L1} &= \frac{e^2 u_l}{2\hbar\omega_{L1}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_{01}} \right) \\ &= \frac{e^2}{2r_p \hbar\omega_{L1}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty 1}} - \frac{1}{\epsilon_{01}} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

是电子-LO 声子相互作用的耦合常数, 其中

$$r_p = u_l^{-1} = \left(\frac{\hbar}{2m_b\omega_{L1}} \right)^{1/2} \quad (12)$$

为极化子半径, $\epsilon_{\infty 1}$ (ϵ_{01}) 表示阱材料的高频(静态)介电常数.

(1) 式中的第四项表示 IO 声子模的哈密顿量

$$H_{10} = \sum_{q\sigma t} \hbar \omega_{\sigma t} b_{q\sigma t}^+ b_{q\sigma t}, \quad (13)$$

其中 $\omega_{\sigma t}$ 为量子数分别取 $\sigma = \pm$, $t = \pm$ 的四支 IO 声子的频率, 其色散关系为

$$\omega_{\pm t}^2 = \frac{B_i(q) \pm [B_i^2(q) - 4A_i(q)C_i(q)]^{1/2}}{2A_i(q)} \quad (14)$$

$$A_i(q) = a_1^t + a_2^t, \quad (15)$$

$$B_i(q) = a_1^t(\omega_{11}^2 + \omega_{12}^2) + a_2^t(\omega_{12}^2 + \omega_{11}^2), \quad (16)$$

$$C_i(q) = a_1^t \omega_{11}^2 \omega_{12}^2 + a_2^t \omega_{12}^2 \omega_{11}^2, \quad (17)$$

$$a_1^\pm = (1 \mp e^{-2qd}) \epsilon_{\infty 1}, \quad (18)$$

$$a_2^\pm = (1 \pm e^{-2qd}) \epsilon_{\infty 2}, \quad (19)$$

(1) 式中的最后一项是电子-IO 声子相互作用的哈密顿量

$$H_{e-10} = \sum_{q\sigma t} [W_{q\sigma t}(z) e^{iq \cdot \mathbf{p}} b_{q\sigma t} + \text{H.c.}], \quad (20)$$

其中

$$W_{q\sigma+}(z) = -iD_{\sigma+}(qd) \left(\frac{2\pi \hbar e^2}{Sq\omega_{\sigma+}} \right)^{1/2} \frac{\cosh(qz)}{\cosh(qd)} \quad (21)$$

$$W_{q\sigma-}(z) = -iD_{\sigma-}(qd) \left(\frac{2\pi \hbar e^2}{Sq\omega_{\sigma-}} \right)^{1/2} \frac{\sinh(qz)}{\sinh(qd)} \quad (22)$$

$$D_{\sigma+}(qd) = [2\xi_{1\sigma+}^2 \tanh(qd) + 2\xi_{2\sigma+}^2]^{1/2}, \quad (23)$$

$$D_{\sigma-}(qd) = [2\xi_{1\sigma-}^2 \coth(qd) + 2\xi_{2\sigma-}^2]^{1/2}, \quad (24)$$

$$\xi_{\lambda\sigma t} = \frac{\epsilon_{\lambda\sigma t} - \epsilon_{\infty \lambda}}{\omega_{T\lambda}(\omega_{0\lambda} - \epsilon_{\infty \lambda})^{1/2}}, \quad (25)$$

$$\epsilon_{\lambda\sigma t} = \epsilon_{\infty \lambda} \frac{\omega_{L\lambda}^2 - \omega_{\sigma t}^2}{\omega_{T\lambda}^2 - \omega_{\sigma t}^2} (\lambda = 1, 2). \quad (26)$$

这里 $b_{q\sigma t}^+$ ($b_{q\sigma t}$) 表示频率为 $\omega_{\sigma t}$, 波矢为 \mathbf{q} 的 IO 声子产生 (湮没) 算符, ω_{11} (ω_{12}) 和 ω_{11} (ω_{12}) 分别表示材料“1”(“2”)中纵光学声子和横光学声子的振动频率, $\epsilon_{\infty 2}$ (ϵ_{02}) 表示垒材料的高频 (静态) 介电常数.

首先, 对电子的 x - y 方向运动的动量和坐标引进 Tokuda 改进的线性组合算符^[22]:

$$P_j = \left(\frac{m_{\parallel} \hbar \lambda}{2} \right)^{1/2} (B_j + B_j^+ + p_{0j}), \quad (27)$$

$$\rho_j = i \left(\frac{\hbar}{2m_{\parallel} \lambda} \right)^{1/2} (B_j - B_j^+), \quad (28)$$

其中 λ , p_{0j} ($j = x, y$) 为变分参量, λ 表示极化子的振动频率.

为了求有限温度下量子阱中极化子的有效质量, 我们效仿一些文献^[3, 23, 24]中用变分法研究有限温度下的三维系统的方法, 讨论变分函数

$$J = U_2^{-1} U_1^{-1} (H - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{\parallel T}) U_1 U_2$$

在 $|\psi\rangle$ 态中的平均值 \bar{J} 的极值问题, 按变分原理

$$\delta \bar{J} = \langle \psi | U_2^{-1} U_1^{-1} (H - \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}_{\parallel T}) U_1 U_2 | \psi \rangle = 0, \quad (29)$$

这里

$$\mathbf{P}_{\parallel T} = \mathbf{P}_{\parallel} + \sum_{kmp} \hbar k a_{kmp}^+ a_{kmp} + \sum_{q\sigma t} \hbar \mathbf{q} a_{q\sigma t}^+ a_{q\sigma t} \quad (30)$$

是系统的总动量算符, \mathbf{P}_{\parallel} 是电子的动量算符, \mathbf{u} 是 Lagrange 乘数因子, 后面将看到它代表极化子的运动速度.

$$U_1 = \exp \left[-i \left(\sum_{kmp} A_1 a_{kmp}^+ a_{kmp} \mathbf{k} + \sum_{q\sigma t} A_2 b_{q\sigma t}^+ b_{q\sigma t} \mathbf{q} \right) \cdot \mathbf{p} \right], \quad (31)$$

是改进的 LLP 变换, 其中 A_i ($i = 1, 2$) 是表征电子-声子耦合程度的物理量, 对于我们所研究的电子与 IO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合体系, $A_1 = 1$ 和 $A_2 = 0$ ^[19, 21].

$$U_2 = \exp \left\{ \sum_{kmp} [f_{kmp} \csc(k_m z) a_{kmp}^+ - f_{kmp}^* \csc(k_m z) a_{kmp}] + \sum_{q\sigma t} (g_{q\sigma t} b_{q\sigma t}^+ - g_{q\sigma t}^* b_{q\sigma t}) \right\}. \quad (32)$$

是改进的第二 LLP 变换^[19, 21], 其中 f_{kmt} (f_{kmt}^*) 和 $g_{q\sigma t}$ ($g_{q\sigma t}^*$) 都是变分参量, 它们由 \bar{J} 的极值条件来确定.

$$|\psi\rangle = |\phi_l\rangle |\{n_j\}\rangle |\{n_k\}\rangle |\{n_q\}\rangle. \quad (33)$$

是有限温度下系统的尝试波函数, 其中 $|\phi_l(z)\rangle$ 满足

$$\left[\frac{P_z^2}{2m_z} + U(z) \right] |\phi_l(z)\rangle = \epsilon_l |\phi_l(z)\rangle, \quad (34)$$

式中

$$\phi_l(z) = \begin{cases} 0, & |z| > d, \\ \frac{1}{\sqrt{d}} \sin \left[\frac{\pi l}{2d} (z + d) \right], & |z| \leq d, \end{cases} \quad (35)$$

$$\epsilon_l = \frac{\pi^2 \hbar^2 l^2}{8m_z d^2}, \quad l = 1, 2, 3, \dots \quad (36)$$

为电子 z 方向运动的本征波函数和能量本征值. $|\{n_j\}\rangle$, $|\{n_k\}\rangle$ 和 $|\{n_q\}\rangle$ 分别表示极化子态、LO 声子态和 IO 声子态在非零温时的波函数, 其中 $\{n_j\}$ 表示极化子数, $\{n_k\}$ 和 $\{n_q\}$ 分别表示 LO 声子数和 IO 声子数.

在有限温度时, 晶格热振动不但激发实声子, 同时也使抛物势阱中的电子受到激发, 极化子的性质是电子-声子系对各种状态的统计平均. 如文献^[9]所述, 声子频率随温度的上升而下降, 但很不明显,

从极低温至室温仅改变1% ,由此可近似取声子频率为恒值. 因此可以近似地将极化子数和声子数以其平均数代替,按照量子统计

$$\bar{n} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\lambda}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1},$$

$$\bar{n}_k = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{\perp k}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1},$$

$$\bar{n}_q = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{\sigma q}}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad (37)$$

这里考虑了电子运动的对称性 $\bar{n} = \bar{n}_j$ ($j = x, y$), 其中 k_B 是玻尔兹曼常数, T 为热力学温度.

将(27)(28)式和(30)–(37)式代入(29)式,得到变分函数的平均值为

$$\begin{aligned} \bar{J} = & \frac{\pi^2 \hbar^2 L^2}{8m_z d^2} + \left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right) \hbar\lambda + \frac{\hbar\lambda}{4} p_0^2 - \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}}\right)^{1/2} \sum_{kmp} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_0 n_k \\ & + \frac{1}{2m_z} \sum_{kmp} \hbar^2 k_m^2 |f_{kmp}|^2 |\phi_l(z)| \operatorname{csn}^2(k_m z) |\phi_l(z)| (2\bar{n}_k + 1) \\ & + \frac{1}{2m_{\parallel}} \sum_{kmp} \hbar^2 k^2 |f_{kmp}|^2 |\phi_l(z)| \operatorname{csn}^2(k_m z) |\phi_l(z)| (2\bar{n}_k + 1) \\ & + \sum_{kmp} [f_{kmp} |\phi_l(z)| V_{kmp} \operatorname{csn}(k_m z) |\phi_l(z)| + \text{H. c.}] \\ & + \sum_{kmp} |f_{kmp}|^2 |\phi_l(z)| \operatorname{csn}^2(k_m z) |\phi_l(z)| \left(\hbar\omega_{\perp l} - \frac{\hbar}{m_{\parallel}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_0\right) \\ & + \sum_{kmp} \hbar\omega_{\perp l} \bar{n}_k + \sum_{q\sigma l} \hbar\omega_{\sigma l} \bar{n}_q + \sum_{q\sigma l} \hbar\omega_{\sigma l} |g_{q\sigma l}|^2 \\ & + \sum_{q\sigma l} [g_{q\sigma l} |\phi_l(z)| W_{q\sigma l} |\phi_l(z)| B(\bar{n}) \exp\left(-\frac{\hbar q^2}{4m_{\parallel} \lambda}\right) + \text{H. c.}] \\ & - \left(\frac{\hbar\lambda}{2m_{\parallel}}\right)^{1/2} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{u} - \sum_{q\sigma l} \hbar \mathbf{u} \cdot \mathbf{q} |g_{q\sigma l}|^2, \end{aligned} \quad (38)$$

其中

$$\operatorname{csn}(k_m z) = \begin{cases} -\sin(k_m z), & m = 1, 3, 5, \dots, \\ \cos(k_m z), & m = 2, 4, 6, \dots, \end{cases} \quad (39)$$

在推导中忽略了多声子之间相互作用引起的小项和波矢高阶小项的贡献.

求 \bar{J} 关于变分参量的极值,可确定各变分参量. 利用变分技术,得

$$\begin{aligned} f_{kmp} = & -\frac{iB}{(k^2 + k_m^2)^{1/2}} |\phi_l(z)| \operatorname{csn}^2(k_m z) |\phi_l(z)| \left\{ |\phi_l(z)| \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\parallel}} \operatorname{csn}^2(k_m z) \right. \\ & \left. + \frac{\hbar^2 k_m^2}{2m_z} \operatorname{csn}^2(k_m z) |\phi_l(z)| (2\bar{n}_k + 1) + \hbar\omega_{\perp l} |\phi_l(z)| \operatorname{csn}^2(k_m z) |\phi_l(z)| \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (40)$$

$$g_{q\sigma l} = -\frac{|\phi_l(z)| W_{q\sigma l} |\phi_l(z)| B(\bar{n}) e^{-\frac{\hbar q^2}{2m_{\parallel} \lambda}}}{\hbar\omega_{\sigma l} - \hbar \mathbf{u} \cdot \mathbf{q}}, \quad (41)$$

其中

$$\begin{aligned} B(\bar{n}) = & \{n_j\} \exp\left[-\left(\frac{\hbar q^2}{4m_{\parallel} \lambda}\right)^{1/2} \sum_j B_j^+ q_j\right] \exp\left[\left(\frac{\hbar q^2}{4m_{\parallel} \lambda}\right)^{1/2} \sum_j B_j^+ q_j\right] | \{n_j\} \\ = & 1 - \bar{n} \frac{\hbar q^2}{2m_{\parallel} \lambda} + O\left(\frac{\hbar q^2}{2m_{\parallel} \lambda}\right)^2, \end{aligned} \quad (42)$$

$$\lambda = \left\{ \frac{16\pi^2 \omega_{\perp l}^2 \alpha_{\perp l} \epsilon_{01} \epsilon_{\infty 1}}{d^3 u_l^3 (\epsilon_{01} - \epsilon_{\infty 1}) (2\bar{n} + 1)} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} \frac{D_{\sigma+}^2(x) \tanh^2(x)}{(\pi^2 + x^2)^2 \omega_{\sigma+}^2} e^{-\frac{\omega_{\perp l} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda}} \left[1 - \bar{n} \left(\frac{\omega_{\perp l} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda} - 1\right)\right] dx \right\}^{1/2}. \quad (43)$$

由(43)式所确定的 λ 不仅与 d 有关,而且还与 n 有关,应和(37)式自洽. 将(37)式代入(43)式,就

可得到 λ 与 d, T 的关系. 就目前所知,尚无人讨论过量子阱中极化子的振动频率及其温度特性.

(43) 式表明, 在量子阱中电子与 IO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合极化子的振动频率只取决于电子与 IO 声子相互作用, 而与 LO 声子无关. 这一结果与文献[25]的结论一致. 由(43)式还可以看出, 在量子阱中的四支 IO 声子当中, 只有频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子与电子相互作用对极化子的振动频率有贡献, 而频率为 ω_{+-} 和 ω_{--} 的另外两支 IO 声子与电子相互作用对极化子的振动频率没有贡献.

为了进一步得到极化子动量的平均值, 我们假定体系处于 z 方向运动的基态 ($l=1$), 并令 $m_{\parallel} = m_z = m_b$, 则

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{P}}_{\parallel T} &= \phi(z) | \{ \bar{n}_q \} | | \{ \bar{n}_k \} | | \{ \bar{n}_j \} | U_2^{-1} U_1^{-1} \\ &\times \mathbf{P}_{\parallel T} U_1 U_2 | \{ \bar{n}_j \} | | \{ \bar{n}_k \} | | \{ \bar{n}_q \} | \phi(z) \\ &= m_{\text{e-ph}}^* \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (44)$$

其中 $m_{\text{e-ph}}^*$ 是极化子的有效质量

$$\begin{aligned} m_{\text{e-ph}}^* &= \frac{m_b}{1 - \frac{2\alpha_l}{du_l} \left(\frac{3}{2} I_1 + \sum_{m=2,3,4,\dots} I_m \right)} \\ &+ \frac{16\pi^2 \epsilon_{01} \epsilon_{\infty 1} \alpha_{l1} \omega_{l1}^2 m_b}{d^3 u_l^3 (\epsilon_{01} - \epsilon_{\infty 1})} \\ &\times \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} \frac{D_{\sigma+}^2(x) \tanh^2(x)}{(\pi^2 + x^2)^2 \omega_{\sigma+}^4} e^{-\frac{\omega_{l1} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda}} \\ &\times \left(1 - \bar{n} \frac{\omega_{l1} x^2}{d^2 u_l^2 \lambda} \right)^2 dx. \end{aligned} \quad (45)$$

从(45)式可以看出, 量子阱中极化子的有效质量由两部分组成: 等号右边第一项是由电子-LO 声子相互作用所诱生的极化子的有效质量, 第二项则是电子-IO 声子相互作用对有效质量的贡献. 由(45)式还可以看出, 在四支 IO 声子与电子相互作用中, 只有频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子与电子相互作用对极化子的有效质量有贡献, 而频率为 ω_{+-} 和 ω_{--} 的另外两支 IO 声子与电子相互作用对极化子的有效质量没有贡献. 很显然, 量子阱中极化子的有效质量与量子阱的半宽度(以下简称阱宽) d 和温度 T 有关.

3. 结果与讨论

为了更清楚地说明量子阱中电子与 LO 声子弱耦合、与 IO 声子强耦合极化子的有效质量随温度的变化规律, 我们选择了一对具有较大电子-IO 声子

耦合常数和较小电子-LO 声子耦合常数的材料 AgCl 和 KI 作为量子阱内、外极性介质进行数值计算. 所用材料的参数如表 1 所示, 数值结果分别示于图 2 至图 4. 图中选取极化子的半径 r_p 为长度单位, 以电子的带质量 m_b 作为质量单位.

表 1 材料的特征参量^[26]

材料	ϵ_0	ϵ_{∞}	$\omega_l/10^{14} \text{s}^{-1}$	$\omega_T/10^{14} \text{s}^{-1}$	α_L	α_s	m_b/m_e
AgCl	9.5	3.97	0.3425	0.2258	1.97	2.89	0.297
KI	4.68	2.68	0.2733	0.2068	2.5	4.04	0.434

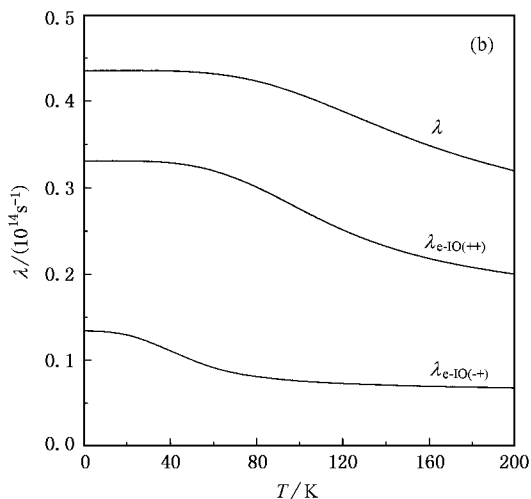
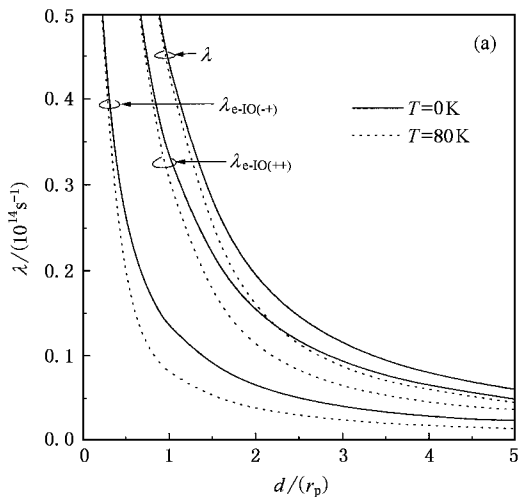


图 2 (a) KI/AgCl/KI 量子阱中极化子的振动频率和不同支声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的振动频率在不同温度下随阱宽的变化 (b) KI/AgCl/KI 量子阱中极化子的振动频率和不同支声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的振动频率在阱宽 $d=1.0r_p$ 时随温度的变化

图 2(a)描绘了 KI/AgCl/KI 量子阱中频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的振动频率 $\lambda_{e-10(++)}$ 和 $\lambda_{e-10(-+)}$, 以及这两支 IO 声子同时与电子相互作用时所诱生的极化子的振动频率 λ 在不同温度 T 时随量子阱宽 d 的变化关系. 图 2(b)描绘了 KI/AgCl/KI 量子阱中频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的振动频率 $\lambda_{e-10(++)}$ 和 $\lambda_{e-10(-+)}$, 以及这两支 IO 声子同时与电子相互作用时所诱生的极化子的振动频率 λ 在阱宽 $d = 1.0r_p$ 时随温度 T 的变化关系. 由图 2(a)可以看出, 频率 $\lambda_{e-10(++)}$, $\lambda_{e-10(-+)}$ 和 λ 都随阱宽 d 的增加而减小, 这说明在量子阱宽较小时, 电子与 IO 声子的耦合较强, 在量子阱较宽的情况下, 电子与 IO 声子的相互作用就比较弱了. 图 2 还表明, 无论是频率 $\lambda_{e-10(++)}$ 和 $\lambda_{e-10(-+)}$ 还是 λ 都随着温度的升高而下降, 这一结果的物理图像是显然的, 随着温度的升高, 晶格热振动的混乱度增强, 电子-晶格的极化场减弱, 也就是说, Huybrechts 所描述的强耦合极化子所处的抛物势阱变浅, 从而电子的热振动频率减小. 由图 2 不难看出, 频率 $\lambda_{e-10(++)}$ 的值比 $\lambda_{e-10(-+)}$ 的值要大, 这表明量子阱中不同支声子与电子耦合的强烈程度是不同的, 频率为 ω_{++} 的 IO 声子与电子的耦合较频率为 ω_{-+} 的 IO 声子与电子的耦合更强一些. 除此之外, 从由图 2 我们还发现一个有趣的关系, $\lambda \neq \lambda_{e-10(++)} + \lambda_{e-10(-+)}$, 这一现象说明, 电子与不同支 IO 声子相互作用对极化子振动频率的贡献不是线性的, 它反映界面声子的色散对电子-声子相互作用是有影响的, 这是这种量子阱异质结构所造成的一个突出问题.

图 3(a)描绘了 KI/AgCl/KI 量子阱中频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 $m_{e-10(++)}^*$ 和 $m_{e-10(-+)}^*$, 以及这两支 IO 声子同时与电子相互作用时所诱生的极化子的有效质量 m_{e-10}^* 在温度 $T = 0K$ 时随阱宽 d 的变化关系. 图 3(b)描绘了 KI/AgCl/KI 量子阱中频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 $m_{e-10(++)}^*$ 和 $m_{e-10(-+)}^*$, 以及这两支 IO 声子同时与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 m_{e-10}^* 在阱宽 $d = 1.0r_p$ 时随温度 T 的变化关系. 由图 3(a)可以看出, 有效质量 $m_{e-10(++)}^*$, $m_{e-10(-+)}^*$ 和 m_{e-10}^* 都随阱宽 d 的增加

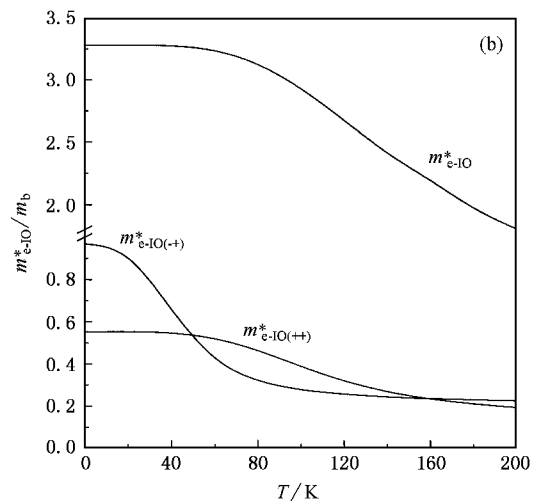
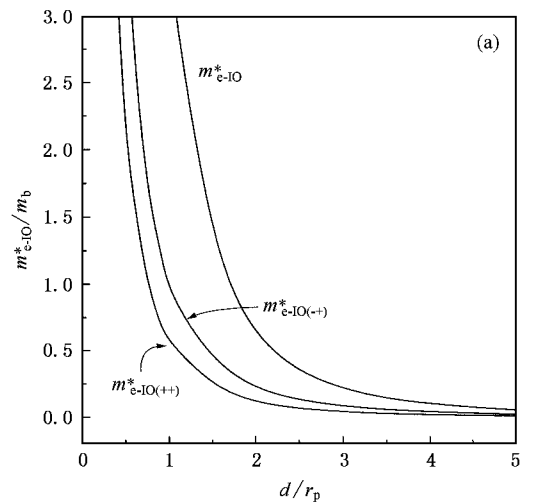


图 3 (a) KI/AgCl/KI 量子阱中 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量和不同支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量在温度 $T = 0K$ 时随阱宽的变化 (b) KI/AgCl/KI 量子阱中 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量和不同支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量在阱宽 $d = 1.0r_p$ 时随温度的变化

而减小, 这说明在量子阱宽较小时, 电子与 IO 声子的耦合较强, 而阱宽较大时, 电子与 IO 声子的相互作用就比较弱了. 由图 3(b)可以看出, 量子阱中不同支 IO 声子与电子相互作用对极化子有效质量的贡献随温度的变化而变化, 当 $T < 50K$ 或 $T > 160K$ 时, $m_{e-10(-+)}^* > m_{e-10(++)}^*$, 而当 $50K < T < 160K$ 时, $m_{e-10(-+)}^* < m_{e-10(++)}^*$. 不仅如此, 两支 IO 声子同时与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 m_{e-10}^* 明显大于这两支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量之和, 即 $m_{e-10}^* > m_{e-10(-+)}^* + m_{e-10(++)}^*$, 这说明电子与不同支 IO 声子相互作用对

极化子有效质量的贡献也不是线性的.由图 3(b)也不难看出,LO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量随温度的升高而减小,但不同支 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量随温度的变化情况有很大不同.频率为 ω_{-+} 的 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 $m_{e-IO(-+)}^*$ 在温度 $T < 20\text{K}$ 和 $T > 80\text{K}$ 时随温度 T 的升高而缓慢减小,但当 $20\text{K} < T < 80\text{K}$ 时它随温度 T 的升高而迅速减小.频率为 ω_{++} 的 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 $m_{e-IO(++)}^*$ 和两支 IO 声子同时与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 m_{e-IO}^* 随温度 T 的变化规律基本相似,在温度 $T < 80\text{K}$ 时它们随温度 T 的变化不明显,但当温度 $T > 80\text{K}$ 时它们随温度 T 的升高而明显减小.

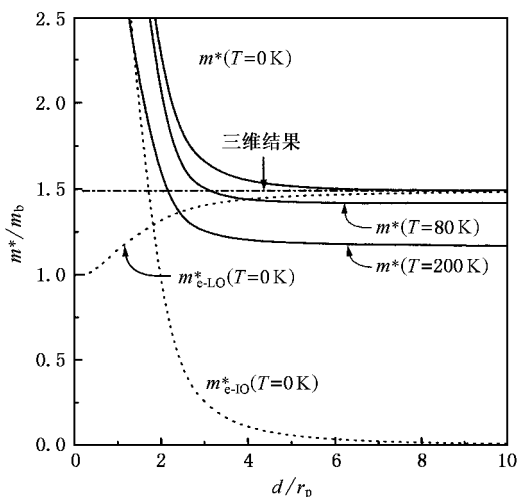


图 4 KI/AgCl/KI 量子阱中极化子的总有效质量随阱宽和温度的变化(图中两条虚线分别表示 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量和 LO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量在 $T=0\text{K}$ 时随阱宽 d 的变化关系,点划线表示三维结果)

图 4 描绘了 KI/AgCl/KI 量子阱中极化子的总有效质量在不同温度 T 下随阱宽 d 的变化关系.图中两条虚线分别表示 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 m_{e-IO}^* 和 LO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量 m_{e-LO}^* .在 $T=0\text{K}$ 时随阱宽 d 的变化关系,点划线表示三维(3D)结果.由图 4 可以看出,电子与 LO 声子相互作用所诱生的有效质量 m_{e-LO}^* 在 $d < 6r_p$ 时,随阱宽 d 的增加而迅速增加,在阱宽 $d > 12r_p$ 时,随阱宽 d 的增加而缓慢增加,最后趋于一定值 $1/(1 - \alpha_l/6)$,这个结果与

文献 3—5 得到的三维弱耦合极化子有效质量的结论相同.电子与 IO 声子相互作用所诱生的有效质量 m_{e-IO}^* 在阱宽较窄时很大,但随阱宽 d 的增加而很快减小,最后趋于零.这说明在量子阱宽度较小时,IO 声子的作用尤为重要.由图 4 不难看出, KI/AgCl/KI 量子阱中极化子的总有效质量 m_{e-ph}^* 随阱宽 d 的增加而迅速减小,且最后缓慢趋向三维结果 $1/(1 - \alpha_l/6)$.这说明,在阱宽较窄时,电子与 IO 声子相互作用对有效质量的贡献是主要的,随着阱宽 d 的增加,电子与 LO 声子相互作用对有效质量的贡献占主导地位.另外,图 4 表明,极化子的总有效质量 m_{e-ph}^* 随温度 T 的升高而减小,这一结果与文献 [1, 3—5] 的结论一致,表明随着温度的升高,晶格的无规则运动增强,电子-声子相互作用减弱,直至电子完全失去它的声子云而变为自由电子.这与文献 27、28 的结论一致,并且符合实际.显而易见,当 $T < 80\text{K}$ 时,极化子的总有效质量 m_{e-ph}^* 随温度的变化不明显,但当 $T > 80\text{K}$ 时, m_{e-ph}^* 随温度的升高而显著减小.

4. 结 论

本文在 Huybrechts 关于强耦合极化子的模型基础上,采用 Tokuda 改变的线性组合算符和改进的 LLP 变分法,研究了晶格热振动对无限势垒量子阱中电子与 IO 声子强耦合、与 LO 声子弱耦合极化子的影响.推导出作为阱宽和温度函数的极化子有效质量的表达式.尤其是得到了量子阱中极化子的振动频率及其随阱宽和温度变化的规律.研究结果表明,在量子阱中不同支声子与电子相互作用对极化子的振动频率和有效质量的贡献以及它们随量子阱宽和温度变化的情况不尽相同:1)量子阱中极化子的振动频率只取决于电子与 IO 声子相互作用,而与 LO 声子无关,而且只有频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子与电子相互作用对极化子的振动频率有贡献.另外,量子阱中电子同时与两支 IO 声子相互作用所诱生的极化子的振动频率并不等于频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的振动频率之和,它反映了 IO 声子的色散对电子-声子相互作用是有影响的.2)量子阱中极化子的有效质量由两部分组成:一部分是由于电子-LO 声子相互作用所引起的极化子效应,另一部分则是电子-IO 声子相互作用所诱生的极化子的有

效质量.3)在四支 IO 声子当中,只有频率为 ω_{++} 和 ω_{-+} 的两支 IO 声子与电子相互作用对极化子的有效质量有贡献,不同支 IO 声子与电子相互作用对极化子有效质量的贡献随温度的变化而变化,而且电子同时与两支 IO 声子相互作用所诱生的极化子的有效质量并不等于这两支 IO 声子分别与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量之和.4)极化子的总有效质量随阱宽的增加而迅速减小,并最后缓慢趋向三维结果,反映了在阱宽较窄时,电子与 IO 声子相互作用对有效质量的贡献是主要的,随着阱宽的增加,电子与 LO 声子相互作用对有效质量的贡献占主导地位.5)极化子的有效质量随温度的升高而减小,但不同支 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量随温度的变化情况有很大不同.频率为 ω_{-+} 的 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量在温度 $T < 20\text{K}$ 和 $T > 80\text{K}$ 时随温

度 T 的升高而缓慢减小,但当 $20\text{K} < T < 80\text{K}$ 时它随温度 T 的升高而迅速减小.频率为 ω_{++} 的 IO 声子与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量和两支 IO 声子同时与电子相互作用所诱生的极化子的有效质量以及极化子的总有效质量随温度 T 的变化规律基本相似,在温度 $T < 80\text{K}$ 时它们随温度 T 的变化不明显,但当温度 $T > 80\text{K}$ 时它们随温度 T 的升高而明显减小.

本文的方法和结果适用于无限势垒量子阱中的电子-声子耦合体系的基态,其中电子与 LO 声子的耦合常数小于 6、与 IO 声子的耦合常数大于 2.5,温度低于德拜(Debye)温度.

实际的量子阱都是有限势垒量子阱,由于该结构中电子-声子相互作用更加复杂,有待于对计算方法等作进一步的改进研究.

- [1] Yokota T 1983 *Busseiron-kenkyu* **69** 137
- [2] Futton T 1956 *Phys. Rev.* **103** 1712
- [3] Li Y C and Gu S W 1990 *J. Phys. : Condens. Matter.* **2** 1149
- [4] Xiao J L and Xiao W 1997 *J. Phys. : Condens. Matter.* **9** 10567
- [5] Xiao J L, Eerdunchoalu and Xiao W 2002 *J. Phys. Soc. Jpn.* **71** 1332
- [6] Peeters F M and Devreese J T 1982 *Phys. Rev. B* **25** 7302; 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6300
- [7] Fedyanin V K and Rodriguez C 1982 *Phys. Stat. Sol(b)*. **110** 105
- [8] Qin R H and Gu S W 1997 *Solid State Communication* **104** 425
- [9] Brummell M A, Nicholas R J, Hopkins M A *et al* 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 77
- [10] Morri N and Ando T 1989 *Phys. Rev. B* **40** 6175
- [11] Liang X X and Wang X 1991 *Phys. Rev. B* **43** 5155
- [12] Sarma D and Stopa M 1987 *Phys. Rev. B* **36** 9595
- [13] Comas F, Trallero-Gine C and Riera R 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5907
- [14] Hai G Q, Peeters F M and Derreese J T 1990 *Phys. Rev. B* **42** 11063
- [15] Zheng Y S and Lu T Q 1995 *Physica B* **212** 395
- [16] Shi J J, Zhu X Q, Liu Z X *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **55** 4670
- [17] Haga E 1954 *Progr. Theor. Phys.* **11** 449
- [18] Pan J S 1985 *Phys. Stat. Sol(b)*. **127** 307
- [19] Huybrechts J 1976 *J. Phys. C : Solid State Phys.* **9** L211
- [20] Feynman R P 1955 *Phys. Rev.* **97** 660
- [21] Lee T D, Low F M and Pines D 1953 *Phys. Rev.* **90** 297
- [22] Tokuda N 1980 *J. Phys. C : Solid State Phys.* **13** L851
- [23] Li C M, Gu S W, Lam C C 1997 *Physica B* **229** 361
- [24] Sun B Q, Xiao W and Xiao J L 1994 *J. Phys. Condens. Matter.* **6** 8167
- [25] Xiao J L and Xiao W 1998 *Phys. Rev. B* **58** 1678
- [26] Kartheuser E 1972 *Polaron in Ionic Crystals and Polar Semiconductors*(North-Holland, New York)
- [27] Manka R 1979 *Phys. Stat. Sol(b)*. **93** 53
- [28] Pan J S 1985 *Phys. Stat. Sol(b)*. **128** 663

Effects of lattice vibration on the effective mass of quasi-two-dimensional strong-coupling polaron *

Eerdunchaolu^{1)†} Li Shu-Shen²⁾ Xiao Jing-Lin¹⁾

¹⁾ *Department of Mathematics and Physics, Hebei Normal University of Science & Technology, Qinhuangdao 066004, China*

²⁾ *National Laboratory for Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*

³⁾ *Department of Physics, Inner Mongolia University for Nationalities, Tongliao 028043, China*

(Received 13 October 2004 ; revised manuscript received 22 November 2004)

Abstract

The effects of lattice vibration on the system in which the electron is weakly coupled with bulk longitudinal optical phonons and strongly coupled with interface optical phonons in an infinite quantum well were studied by using Tokuda ' linear-combination operator and a modified LLP variational method. The expressions for the effective mass of the polaron in a quantum well QW as functions of the well 's width and temperature were derived. In particular, the law of the change of the vibration frequency of the polaron changing with well 's width and temperature are obtained. Numerical results of the effective mass and the vibration frequency of the polaron for KI/AgCl/KI QW show that the vibration frequency and the effective mass of the polaron decrease with increasing well 's width and temperature, but the contribution of the interaction between the electron and the different branches of phonons to the effective mass and the vibration frequency and the change of their variation with the well 's width and temperature are greatly different.

Keywords : quantum well, strong-coupling polaron, vibration frequency, effective mass, temperature dependence

PACC : 6320K, 7138

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10174076), the Special Foundation for State Major Basic Research Program of China (Grant No. G2001CB309500), the Natural Science Foundation of Inner Mongolia, China (Grant No. 200208020110), and the Major Project of Inner Mongolia for University (Grant No. NJ02074).

† E-mail : zntljtw@public.hh.nm.cn.