

各向异性固体光谱中的鞍点性质

余招贤 莫 党

(中山大学物理学系, 广州 510275)

摘 要 在分数维空间模型下, 研究三维(3D)各向异性固体带间光谱的鞍点特性, 得到了鞍点邻近区域电子能态密度和介电函数的解析表达式, 并说明只能对其中一种类型鞍点的光谱结构作适当阶数的分数微分处理后可以得到对称的洛伦兹线型。

关键词 鞍点, 能态密度, 介电函数, 分数维空间

分类号 O433.3

自从发现自相似结构的分形现象后, 分数维度问题受到了广泛的重视。对各向异性固体由带间直接跃迁所致的介电函数的 Van Hove 奇点结构进行分析处理, 也可以确定一种分数维度^[1~3], 这种在非分形体中出现的分数维度, 与固体中电子晶格相互作用各向异性程度相关, 是一种动力学空间有效维度, 它一般不同于固体的几何拓扑维度。

过去处理介电函数谱的传统方法是求整数阶微分谱, 以突出奇点附近的光谱结构, 用整数维奇点的理论公式拟合微分谱, 获得一些能带参数。何星飞、莫党提出的分数微分谱方法, 对处理这类整数维临界点结构则更为方便^[1]。再者, 根据分数维空间模型的假设, 在一阶近似下, 3D 各向异性固体中的 Bloch 电子态的元激发性质, 可以用 αD ($1 < \alpha < 3$) 空间中各向同性理想气体作等效的描述^[2]。文 [4] 已经证明, 在 αD 空间中, 应用分数微分谱方法处理极小点附近介电函数仍可得到对称的 Lorentz 形, 由此方便地确定能带参数和维度值 α , 而对 αD 极大点则无此性质。

本文继续在分数维空间模型下, 讨论 3D 各向异性固体光谱中的鞍点性质, 首先计算鞍点的能态密度和相关的介电函数, 然后说明分数微分能否得到对称线型。

1 鞍点的能态密度

对于 3D 各向异性固体, 考虑用一个 αD ($1 < \alpha < 3$) 分数维空间作等效的描述, 其中最多存在两种鞍点, 分别设为 S_1 型和 S_2 型, 显然在 $\alpha = 3$ 时, S_1, S_2 即为一般文献中所称的 M_1 和 M_2 。

收稿日期: 1993-03-17

在 αD 空间中, 能态密度计算公式推广为

$$N(E) = (2V_a / (2\pi)^\alpha) \int_{BZ} d^*k \delta[E - E(\vec{k})] \quad (1)$$

其中 V_a 为点阵元胞体积, 对 \vec{k} 的积分限于第一布里渊区 (BZ). \vec{k} 的体积元可写成:

$$d^*k = \sigma (\alpha - 1) l^{\alpha-2} dp dl \quad (2)$$

其中 p, l 为 \vec{k} 向 αD 空间中任一坐标轴的投影及其垂直分量, $\sigma(\alpha) = 2\pi^{\frac{\alpha}{2}} / \Gamma(\frac{\alpha}{2})$.

根据 S_1 型鞍点的等能面方程, 从 (1) 和 (2) 式出发, 可以得到其态密度表达式 (令 $2V_a = 2^* \pi^*$)

$$N(E) = \begin{cases} \frac{1}{2} \sigma(\alpha - 1) \int_1^{K_h} (y^{\alpha-2} / \sqrt{y^2 - 1}) dy & E \geq E_g \\ \frac{1}{2} \sigma(\alpha - 1) \int_0^{\sqrt{K_h^2 - a^2}} (y^{\alpha-2} / \sqrt{y^2 + 1}) dy & E < E_g \end{cases} \quad (3)$$

其中 E_g 为鞍点处能隙, $a^2 = |E - E_g|$, K_h 为 BZ 边界最大波矢值.

根据 (3) 式, 可以证明在鞍点附近, 即 $a \ll K_h$ 时, 态密度有下列渐近形式

$$N(E) = \begin{cases} A (E - E_g)^{\frac{\alpha}{2}-1} & E \geq E_g \\ B (E_g - E)^{\frac{\alpha}{2}-1} & E < E_g \end{cases} \quad (1 < \alpha < 2) \quad (4)$$

$$N(E) = \begin{cases} P - Q (E - E_g)^{\frac{\alpha}{2}-1} & E \geq E_g \\ P - S (E_g - E)^{\frac{\alpha}{2}-1} & E < E_g \end{cases} \quad (2 < \alpha < 3) \quad (5)$$

$$N(E) = \frac{1}{2} \ln(4K_h^2 / |E - E_g|) \quad (\alpha = 2) \quad (6)$$

其中 $A = \frac{1}{2} [\pi^{\frac{\alpha}{2}} / \Gamma(\frac{3-\alpha}{2})] \cdot [\Gamma(\frac{2-\alpha}{2}) / \Gamma(\frac{\alpha-1}{2})]$, $B = \frac{1}{2} \pi^{\frac{\alpha}{2}-1} \Gamma(\frac{2-\alpha}{2})$, $P = \pi^{\frac{\alpha-1}{2}} K_h^{\alpha-2} / [(\alpha-2) \Gamma(\frac{\alpha-1}{2})]$, $Q = [\pi^{\frac{\alpha}{2}} / (\alpha-2)] \Gamma(\frac{4-\alpha}{2}) / [\Gamma(\frac{\alpha-1}{2}) \Gamma(\frac{3-\alpha}{2})]$, $S = [\pi^{\frac{\alpha}{2}-1} / (\alpha-2)] \Gamma(\frac{4-\alpha}{2})$.

显然, 当 $\alpha \rightarrow 1$ 时,

$$N(E) = \begin{cases} 0 & E \geq E_k \\ \frac{1}{2} (E_k - E)^{-\frac{1}{2}} & E < E_k \end{cases} \quad (7)$$

当 $\alpha \rightarrow 3$ 时,

$$N(E) = \begin{cases} \pi K_h & E \geq E_g \\ \pi (K_h - \sqrt{E_g - E}) & E < E_g \end{cases} \quad (8)$$

因此在 $\alpha=1, 2, 3$ 时, 态密度分别与 1D 极大点 (P_1)、2D 鞍点 (D_1)、3D 鞍点 (M_1) 相一致, 即 S_1 型鞍点随 α 从 3 减小到 1 有下列变化规律:

$$M_1 \rightarrow D_1 \rightarrow P_1$$

图 1 表示 α 变化时态密度从 M_1 向 D_1 转变的过程. 对 αDS_2 型鞍点, 态密度仍可类似地表示为

$$N(E) = \begin{cases} \frac{1}{2} \sigma(\alpha - 1) a^{\alpha-2} \int_0^{\sqrt{K_h^2 - a^2}} (y^{\alpha-2} / \sqrt{y^2 + 1}) dy & E \geq E_k \\ \frac{1}{2} \sigma(\alpha - 1) a^{\alpha-2} \int_1^{K_h} (y^{\alpha-2} / \sqrt{y^2 - 1}) dy & E < E_k \end{cases} \quad (9)$$

我们仍可根据(9)式在 $\alpha \ll K_h$ 时的渐近表达式, 得到 S_2 型鞍点随 α 从3减小到1发生下列变化:

$$M_2 \longrightarrow D_1 \longrightarrow P_0$$

这种鞍点随 α 的转化规律, 与 Masanori Okuyama 等人研究态密度随晶体各向异性变化的结果相一致^[5].

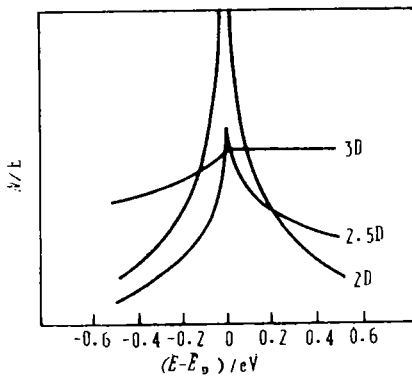


图1 不同 α 值下 S_1 型鞍点附近的态密度

Fig. 1 Density of states near a S_1 saddle point with various values of α

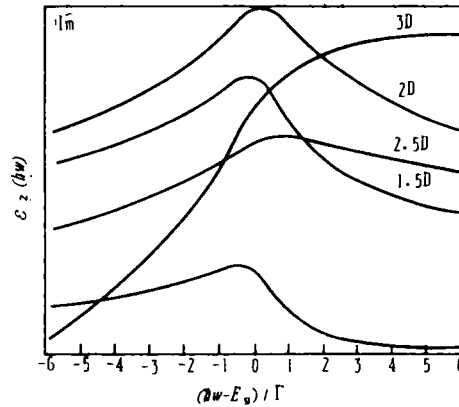


图2 S_1 型鞍点附近介电函数虚部

Fig. 2 The imaginary part of the dielectric function near a S_1 saddle point

2 鞍点附近的介电函数

对 S_1 型鞍点附近的介电函数, 一般为

$$\epsilon(h\nu) = M^2 / (h\nu)^2 \int_{BZ} N(E) dE / (E - h\nu - i\Gamma) \quad (10)$$

其中, M^2 为跃迁矩阵元平方, 积分区域为第一布里渊区, Γ 为展宽参数, $h\nu$ 为光子能量. 我们主要考虑临界点区域对介电函数的贡献, 把其它范围的贡献视为背景项, 因此可用 $N(E)$ 的渐近形式代入(10)式计算. 当 $2 < \alpha < 3$ 时,

$$\begin{aligned} \epsilon(h\nu) &= \frac{M^2}{(h\nu)^2} \left[\int_{E_k}^{E_k + K_h^2} \frac{P - Q(E - E_k)^{\frac{\alpha}{2}-1}}{E - h\nu - i\Gamma} dE + \int_{E_k - K_h^2}^{E_k} \frac{P - S(E_k - E)^{\frac{\alpha}{2}-1}}{E - h\nu - i\Gamma} dE \right] \\ &= \frac{M^2}{(h\nu)^2} \left[\int_0^{K_h^2} \frac{P - Qt^{\frac{\alpha}{2}-1}}{t - \beta} dt - \int_0^{K_h^2} \frac{P - St^{\frac{\alpha}{2}-1}}{t + \beta} dt \right] \end{aligned} \quad (11)$$

在上式变换过程中作了变量代换 $t = \pm(E - E_k)$, 其中 $\beta = h\nu - E_k + i\Gamma$, 由于 Γ 一般较小, 在所考虑区域内 $\beta \approx 0$, 因此 $K_h^2 \gg |\beta|$, 在此条件下可令 $K_h^2 \rightarrow \infty$ 来计算(11)式积分, 只保留与 β 有关的项. 利用复变函数回路积分的方法, 可以计算出上述积分

$$\epsilon(h\nu) = [M^2 / (h\nu)^2] \left[-P\pi i + (S + Qi^{-\alpha}) \left(\pi / \sin \frac{\alpha\pi}{2} \right) \beta^{\frac{\alpha}{2}-1} \right] \quad (12)$$

忽略常数项, 把 P, Q, S 值代入得

$$\epsilon(h\nu) = [C_0 / (h\nu)^2] f(\alpha) (h\nu - E_k + i\Gamma)^{\frac{\alpha}{2}-1} \quad (13)$$

其中 C_0 为常数, $f(\alpha)$ 为与奇点类型相关的因子,

$$f(\alpha) = (1/\sin \frac{\alpha\pi}{2}) [1 + (\pi/\Gamma(\frac{\alpha-1}{2}) \Gamma(\frac{3-\alpha}{2})) i^{-\alpha}] \quad (14)$$

对 $1 < \alpha < 2$ ，同样可证明 (13)、(14) 两式成立。根据 gamma 函数的性质

$$\Gamma(z) \Gamma(1-z) = \pi/\sin z\pi \quad (15)$$

则 (14) 式可改写成

$$f(\alpha) = i^{1-\alpha} \quad (16)$$

对 S_2 型鞍点，可根据 (8)、(11) 作类似的计算，在鞍点附近介电函数仍可写成 (13) 的形式，只是 $f(\alpha)$ 改变为

$$f(\alpha) = (1/\sin \frac{\alpha\pi}{2}) [i^{-\alpha} + (\pi/\Gamma(\frac{\alpha-1}{2}) \Gamma(\frac{3-\alpha}{2}))] = i^{-1} \quad (17)$$

综上所述， αD 中鞍点附近介电函数可表示成 (13) 式的形式，其中 $f(\alpha)$ 扩展定义为

$$f(\alpha) = \begin{cases} i^{1-\alpha} & (\alpha DS_1 \text{ 型鞍点}) \\ i^{-1} & (\alpha DS_2 \text{ 型鞍点}) \end{cases} \quad (18)$$

从 (13) 和 (18) 两式看出，当 α 为整数 1、2、3 时， S_1 附近介电函数分别相应于 M_1 、 D_1 、 P_1 的形式，而 S_2 则对应于 M_2 、 D_1 和 P_0 形式。图 2 所表示的是不同 α 值下 S_1 型鞍点附近介电函数虚部的情形。

3 分数微分谱

下面对 (13) 式所示的介电函数求 $\alpha/2$ 阶微分，关于求 $\alpha/2$ 阶微分的计算方法，可参考文献 [6]，经过冗长的计算，得到：当 $h\nu - \Delta \gg |\beta|$ 时，

$$\frac{d^{\alpha/2} \epsilon(h\nu)}{d(h\nu - \Delta)^{\alpha/2}} = C'_\alpha f(\alpha) i^{-\alpha} \beta^{-1} = C'_\alpha g(\alpha) \left[\frac{1}{h\nu - E_\kappa + i\Gamma} \right] \quad (19)$$

其中 Δ 为分数微积分区间的起点能量值， C'_α 为常数， $g(\alpha)$ 的形式为

$$g(\alpha) = \begin{cases} i & (\alpha DS_1 \text{ 型鞍点}) \\ i^{\alpha-1} & (\alpha DS_2 \text{ 型鞍点}) \end{cases} \quad (20)$$

从 (19)、(20) 看出，只有对 αDS_1 型鞍点的介电函数求 $\alpha/2$ 阶微分，能得到对称 Lorentz 谱形，对 αDS_2 型鞍点则不可能，除非 α 为整数。图 3 和图 4 分别为 $\alpha = 1.5$ 时 S_1 和 S_2 附近介电函数及其 0.75 阶微分谱。

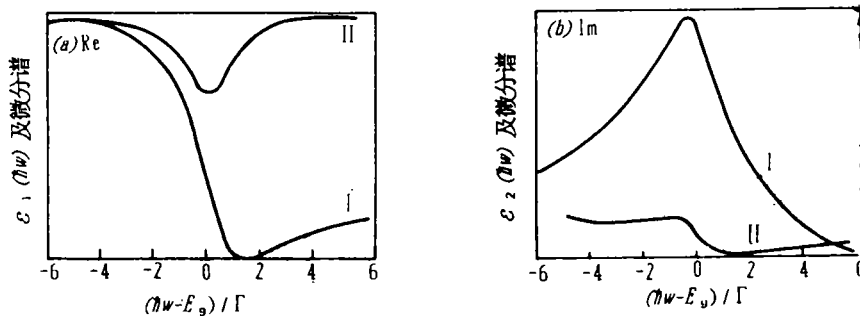


图 3 S_1 型鞍点附近介电函数 (曲线 I) 和微分谱 (曲线 II)。(a) 实部，(b) 虚部

Fig. 3 The dielectric function (curve I) and its derivative spectra (curve II) near a S_1 saddle point

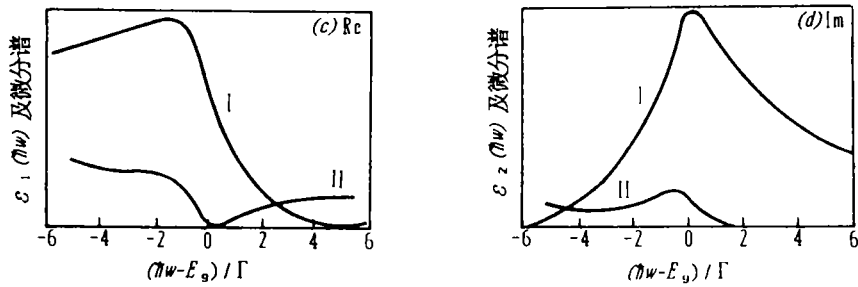


图4 S_2 型鞍点附近介电函数(曲线 I)和微分谱(曲线 II), (c) 实部, (d) 虚部

Fig. 4 The dielectric function (curve I) and its derivative spectra (curve II) near a S_2 saddle point

从图3可以看出, 对 $\epsilon(h\nu)$ 实部的微分可得到对称线型, 相应地其虚部的微分结果仍可看成洛伦兹分布, 只是应属于反对称型的. 图4中则看不到对称的线型存在. 至于微分后曲线前端的一些翘起, 主要是因为分数微分与起点的选择有关, 偏离起点越远的部分, 受起点的影响越小.

本文的结果说明, 对各向异性固体中带间光谱进行分数微积分处理时, 并不是所有的 Van Hove 奇点附近都可得到对称的 Lorentz 线型, 因此确定固体的能带参数和维度时, 要注意奇点的类型和维度. 用分数微积分方法研究离子注入硅的损伤效应^[7]和分析导电聚合物 PAN 的椭圆光谱^[8], 都说明这种模型和方法在一定范围内是合理而有效的, 也证实了极小点和 S_1 型鞍点可应用分数微分谱方法获得对称线型的结论, 但对 S_2 型鞍点和极大点的结论还有待实验上的证实.

参 考 文 献

- 1 He Xingfei, Mo Dang. A fractional integral representation for interband dielectric function of critical point electrons in various dimensional crystals. *Chinese Phys Lett*, 1986, 3: 565
- 2 He X F. Fractional dimensionality and fractional derivative spectra of interband transitions. *Phys Rev B*, 1991, 42: 11751
- 3 He X F. Excitons in anisotropic solids: The model of fractional-dimensional space. *Phys Rev B*, 1991, 423: 2063
- 4 Yu Zhaoxian, Mo Dang. Property of Van Hove critical points in fractional-dimensional space. *Chinese Phys Lett*, 1993, 10: 385
- 5 Kenji Nakao. Effect of crystal anisotropy on differential energy spectra in modulation spectroscopy. *J Phys JPN*, 1974, 37: 431
- 6 Oldham K B, Spanier J. *The Fractional Calculus*, New York: Academic, 1974
- 7 He Xingfei Jiang Renrong, Dang Mo. Optical analysis of radiation effects in ion-implanted Si: Fractional-derivative-spectrum methods. *Phys Rev B*, 1990, 41: 5799
- 8 Mo D, Lin Y Y, Tan J H, et al. Ellipsometric spectra and fractional derivative spectrum analysis of polyaniline films. *Thin Solid Film*, 1993, 234: 468

The Properties of Saddle Points in Optical Spectra of Anisotropic Solids

*Yu Zhaoxian** *Mo Dang*

Abstract The optical properties associated with electron interband allowed direct transitions near saddle points in 3D anisotropic systems are studied by using the fractional – dimensional space model. Density of states and the dielectric function in saddle point regions are obtained analytically. The result shows that a symmetric Lorentzian line shape can be obtained only for one of two types of saddle points after fractional differentiation.

Keywords saddle point, density of states, the dielectric function, fractional – dimensional space

* Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275