УДК 537.311.322

ПРИМЕСНАЯ ФОТОИОНИЗАЦИЯ В КРИСТАЛЛАХ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Э. П. Синявский, Е. Ю. Сафронов

В модели потенциала нулевого радиуса исследовано примесное поглощение света в твердом теле в магнитном поле. Проведен расчет коэффициента поглощения света $K(\Omega)$ при различной конфигурации напряженности магнитного поля и напряженности электрического поля электромагнитной волны. Полученные результаты для $K(\Omega)$ и зависимости энергии связи электрона на короткодействующем центре от напряженности магнитного поля сравниваются с экспериментальными данными.

1. Модель короткодействующего примесного потенциала [1] в настоящее время находит широкое применение для описания кинетических эффектов в твердом теле. В работе [2] исследовался процесс фотоионизации короткодействующей примеси, в [3] изучалась фотоионизация слабосвязанных состояний отрицательных ионов, которые хорошо описываются методом потенциалов нулевого радиуса, в постоянном электрическом поле. Ионизация электрическим полем уровней глубоких примесей в кристаллах с неширокими разрешенными зонами подробно обсуждалась в [4]. В экспериментальной работе [5] исследовалась фотопроводимость в германии с изолированными $D^{(-)}$ состояниями (примеси Sb с энергией основного состояния 0.625 мэВ) в квантующем магнитном поле при 0.35 K.

Привлекательность модели потенциала нулевого радиуса связана с тем, что волновые функции связанного состояния и непрерывного спектра во внешних полях могут быть найдены точно, что позволяет описывать, например, такие эффекты, как кинетику электронов с учетом связанных состояний, возникающих во внешних полях.

В настоящей работе исследуются оптические свойства полупроводников с короткодействующими примесными центрами в однородном магнитном поле. При этом волновые функции и энергия связанного состояния находятся непосредственно из уравнения Шредингера с определенным образом выбранным потенциалом, что эквивалентно использованию граничных условий для логарифмической производной волновой функции [1].

2. Гамильтониан исследуемой задачи запишем в виде

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}, \tag{1}$$

H_0 — гамильтониан, описывающий движение электронов во внешнем поле; оператор взаимодействия заряженной частицы с короткодействующим потенциалом описывается соотношением [1]

$$\hat{V}(\mathbf{r})=V_0\delta(\mathbf{r})\,[1+\mathbf{r}\nabla_r] \tag{2}$$

V_0 определяет мощность потенциальной ямы, которая связана с феноменологическим параметром ε_0 — глубиной залегания уровня.

Если $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — функция Грина

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')=\sum_\lambda \frac{\Psi_\lambda(\mathbf{r})\,\Psi^*_\lambda(\mathbf{r}')}{E-E_\lambda}, \quad H_0\Psi_\lambda(\mathbf{r})=E_\lambda\Psi_\lambda(\mathbf{r}), \tag{3}$$

то волновая функция связанного состояния в поле короткодействующего потенциала (2) может быть представлена в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{V}(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') \, d\mathbf{r}' = V_0 G(\mathbf{r}, 0) \tilde{\Psi}(0), \tag{4}$$

$$\tilde{A}(0) = [1 + \mathbf{r}\nabla_2] A(\mathbf{r}) |_{r \to 0} \equiv \hat{\mathscr{L}} A(\mathbf{r}).$$

Подействуем оператором $\hat{\mathscr{L}}$ слева на соотношение (4), получим

$$V_0 \tilde{G}(0, 0) = 1. \tag{5}$$

Уравнение (5) определяет энергию связанного состояния электрона в потенциале нулевого радиуса в произвольном внешнем поле.

Функцию Грина для электрона в однородном магнитном поле H легко вычислить [1] ($\mathbf{H} \parallel z$)

$$G(\mathbf{r}, 0) = -\frac{m e^{-\frac{ixy}{2R^2}}}{2\pi \sqrt{\pi}\, \hbar^2 R} \int_0^\infty e^{\Delta_0 \tau^2} \frac{d\tau}{\operatorname{sh} \tau^2} e^{-\frac{z^2}{4R^2\tau^2}} e^{-\frac{(x^2+y^2)}{4R^2} \operatorname{cth} \tau^2}, \tag{6}$$

$$1 - \Delta_0 = -\frac{2E(H)}{\hbar\omega_c} \equiv 2\delta, \quad R^2 = \frac{\hbar c}{eH}, \quad \omega_c = \frac{eH}{mc},$$

$E(H)$ — энергия связанного состояния, отсчитываемая от дна зоны проводимости. Подстановка (6) в (4) приводит к следующему выражению для нормированной волновой функции связанного состояния:

$$\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{2\hbar^2}{m} \left[\frac{\pi \sqrt{2}}{R \zeta(3/2;\ \delta)} \right]^{1/2} G(\mathbf{r}, 0), \tag{7}$$

$$\zeta\left(\frac{3}{2};\ \delta\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} e^{-\delta x}}{1 - e^{-x}} dx$$

— дзета-функция Римана. При $H \to 0$ (7) переходит в известное выражение для волновой функции связанного состояния

$$\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{r} e^{-r/a}, \quad \varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad a = \frac{V_0 m}{2\pi\hbar^2}.$$

С учетом (6) уравнение для энергии связанного состояния (5) в однородном магнитном поле принимает вид [6]

$$\int_0^\infty e^{-\delta x^2} \left[\frac{1}{1 - e^{-x^2}} - \frac{1}{x^2} \right] dx - \sqrt{\pi\delta} = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{R}{a}. \tag{8}$$

Если $a < 0$, т. е. в отсутствие магнитного поля нет связанного состояния, $|E(H)|$ с ростом напряженности магнитного поля увеличивается (рис. 1, кривая *1*). Расчет проведен при $m = 0.01 m_0$, $a^{-2} = 2.5 \times 10^{11}$ см$^{-2}$. Именно такая зависимость энергии ионизации примеси от магнитного поля наблюдалась для образцов InSb (точками показаны экспериментальные данные [7]), в которых магнитное поле сильно уменьшает взаимодействие между примесями, так что уровни примесей отщепляются от зоны проводимости. При $a > 0$, т. е. в присутствие магнитного поля в яме существует связанное состояние — ε_0, зависимость $|E(H)|$ от напряженности магнитного поля указана кривой *2* (рис. 1). Вычисления проводились при параметрах $m = 0.2\ m_0$, $\varepsilon_0 = 0.6$ мэВ. Точки — экспериментальные данные из работы [5], в которой исследовалась зависимость энергии связи электрона на примеси Sb (последние трактовались как $D^{(-)}$-центры в кристалле Ge) от напряженности магнитного поля. Для глубоких примесных состояний, как непосредственно следует из (8),

$E(H)$ является менее чувствительной функцией при изменении H в разумных пределах. Кривая *3* рассчитана при $\varepsilon_0=16$ мэВ, $m=0.02\ m_0$.

Волновая функция непрерывного спектра простым образом связана с функцией Грина

$$\Psi(\mathbf{r})=\Psi_\lambda(\mathbf{r})+\int G(\mathbf{r},\ \mathbf{r}')\,\hat{V}(\mathbf{r}')\,\Psi(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'. \tag{9}$$

С учетом явного вида примесного потенциала (2) уравнение (9) можно переписать в виде

$$\Psi(\mathbf{r})=\Psi_\lambda(\mathbf{r})+V_0G(\mathbf{r},\ 0)\,\tilde{\Psi}(0). \tag{10}$$

Выражение для $\tilde{\Psi}(0)$ легко получить, если подействовать оператором $\hat{\mathscr{L}}$ слева на уравнение (10)

$$\tilde{\Psi}(0)=\tilde{\Psi}_\lambda(0)/(1-V_0\tilde{G}(0,\ 0)). \tag{11}$$

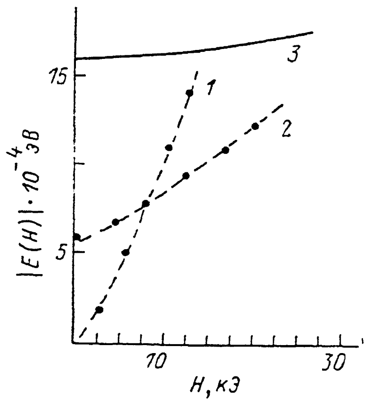

Рис. 1. Зависимость энергии ионизации связанного состояния от магнитного поля.

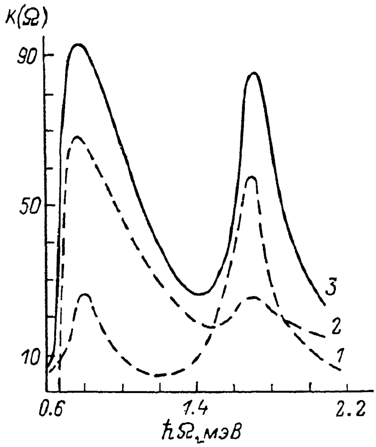

Рис. 2. Частотная зависимость коэффициента поглощения света в магнитном поле.

Подставляя (11) в (10), получим волновую функцию электрона с энергией $E=E_n=\hbar^2k_z^2/2m+\hbar\omega_c\,(n+1/2)$

$$\Psi(\mathbf{r})=\Psi_n(\mathbf{r})+V_0\,\frac{G(\mathbf{r},\ 0)\,\tilde{\Psi}_n(0)}{1-V_0\tilde{G}(0,\ 0)}. \tag{12}$$

Здесь $G(\mathbf{r},\ 0)$ — функция Грина (3) с $E=E_n$, которая после интегрирования по квазиимпульсу k'_x $(\lambda=n',\ k'_z,\ k'_x)$ может быть записана в следующей форме:

$$G(\mathbf{r},\ 0)=-\frac{1}{2\pi L_zR^2}\sum_{n',\ k'_z}\frac{\exp\{-\varkappa/2+i\varkappa y+izk'_z\}\,L_n(\varkappa)}{(n'-n)\,\hbar\omega_c+\hbar^2k_z'^2/2m-\hbar^2k_z^2/2m}, \tag{13}$$

$\varkappa=(x^2+y^2)/2R^2$, $L_n(\varkappa)$ — полиномы Лаггера,

$$\tilde{\Psi}_n(0)=\frac{1}{\sqrt{L_xL_z}}\left[\frac{1}{R^2\pi}\right]^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^nn!}}\,e^{-k_x^2R^2/2}, \tag{14}$$

$\Psi_n(\mathbf{r})$ — волновая функция электрона в магнитном поле [8].

3. В квантующем магнитном поле из-за особенности плотности состояний частотная зависимость коэффициента поглощения света $K(\Omega)$ носит осцилляционный характер. Для описания такого поведения $K(\Omega)$ необходимо учитывать последовательным образом взаимодействие электронов с колебаниями кристаллической решетки [9] или с хаотически расположенными примесями [10]. Выражение для коэффициента погло-

щения света при переходе электрона из примесного состояния ε_i в зону проводимости запишем в следующем виде [11]:

$$K(\Omega)=\frac{2\pi e^2\Omega}{Vc\hbar\sqrt{\varepsilon_0}}\sum_{i,\nu}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\exp\left\{-\Gamma_\nu|t|-\frac{it}{\hbar}(\varepsilon_i-\varepsilon_\nu+\hbar\Omega)\right\}|r_{i\nu}|^2 n_i(1-n_\nu), \qquad (15)$$

i, ν (n, k_x, k_z) описывают начальное и конечное состояния электрона с энергиями $\varepsilon_i=E\,(H)$, $\varepsilon_\nu=\hbar\omega_c n+\hbar^2k_z^2/2m$ и функциями распределения n_i, $n_\nu\,(k_z)$; Γ_ν связана с вероятностью рассеяния носителей с излучением и поглощением одного фонона в однородном магнитном поле; $r_{i\nu}$ — матричный элемент оператора координаты на волновых функциях начального и конечного состояний; Ω — частота поглощающейся электромагнитной волны; ε_0 — диэлектрическая проницаемость; V — объем основной области кристалла. При упругом рассеянии электрона на акустических колебаниях кристаллической решетки при выполнении условия $N_{\mathbf{q}}\approx\approx k_0T/\hbar v\mathbf{q}$ ($N_{\mathbf{q}}$ — функция распределения фононов с импульсом $\mathbf{q}$) легко получить

$$\Gamma_\nu=\gamma/(R\,|k_z|),\quad \gamma=E_1^2k_0Tm/2\pi\rho v^2\hbar^3R, \qquad (16)$$

ρ — плотность кристалла, E_1 — константа деформационного потенциала, T — температура (K).

Рассмотрим случай, когда вектор напряженности $\mathbf{E}$ слабого Ω-света перпендикулярен $\mathbf{H}$. В этой конфигурации $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$, используя волновые функции начального (7) и конечного (12) электронных состояний, можно записать $(r_{i\nu}=x_{i\nu})$

$$x_{i\nu}=i4R^2\left[\frac{\sqrt{2\pi}}{\zeta(3/2;\ \delta)\,2^n n!\,L_xL_z}\right]^{1/2}\frac{e^{-R^2k_x^2/2}}{[2\delta+2n+k_z^2R^2]}\times$$
$$\times\left[\frac{H_{n+1}(Rk_x)}{(2\delta+2n+2+R^2k_z^2)}+\frac{2nH_{n-1}(Rk_x)}{(2\delta+2n+k_z^2R^2-2)}\right], \qquad (17)$$

$H_n(x)$ — полиномы Эрмита. Если подставить (17) в (15), провести интегрирование по k_x и k_z, просуммировать по примесным состояниям i (что приводит в рассматриваемой модели просто к умножению на число локальных центров N_s), то можно получить $(\gamma\ll\omega_c)$

$$K(\Omega)_\perp=K_0\frac{\omega_c}{\Omega}\frac{1}{[1+\Omega/\omega_c]^2}W(\Omega), \qquad (18)$$

где введены следующие обозначения:

$$W(\Omega)=\sum_{n=0}^{\infty}\left[(n+1)+n\left(\frac{1+\Omega/\omega_c}{1-\Omega/\omega_c}\right)^2\right]J(\Delta_n),\quad \Delta_n=\left|-\left(2\delta+2n-\frac{2\Omega}{\omega_c}\right)\right/\gamma_0^{2/3},$$

$$\gamma_0=\frac{2\gamma}{\omega_c},\ K_0=\frac{4\sqrt{2}\,e^2N_s}{mc\sqrt{\varepsilon_0}\,\omega_c\zeta(3/2;\ \delta)\,\gamma_0^{1/3}},\quad J(\Delta_n)=\int_0^\infty\frac{dx}{1+x(x-\Delta_n)^2}. \qquad (19)$$

Если $H\to 0$ $(\gamma_0\to 0)$, то соотношение (18) после суммирования по n приводится к виду

$$K^0(\Omega)=\frac{2^4\pi e^2N_sE^2(0)\,\hbar}{3\sqrt{\varepsilon_0}\,cm\,(\hbar\Omega)^3}\left[\frac{\hbar\Omega}{E(0)}-1\right]^{3/2}, \qquad (20)$$

(20) совпадает с выражением для коэффициента поглощения света, связанным с переходом электрона из донорного примесного центра в зону проводимости, вычисленным в модели Луковского [2].

На рис. 2 (кривая *1*) приведена частотная зависимость $K(\Omega)_\perp$, полученная из (18), в сильных магнитных полях $(\hbar\omega_c\gg k_0T)$. При расчете использовались параметры, близкие к кристаллу Ge: $m=0.085m_0$, $E_1==16$ эВ, $v=2\cdot10^5$ см/с, $\rho=4$ г/см^3 ($E\,(0)=0.6$ мэВ, $N_s=10^{14}$ см$^{-3}$, $T=$

$=10$ K, $H=7.5$ кЭ). С ростом напряженности магнитного поля величины первого (низкочастотного) и второго пиков уменьшаются, а расстояние между ними, естественно, увеличивается. Исследуем частотную зависимость $K(\Omega)$ при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H}$. При такой конфигурации $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ расчет матричного элемента $z_{i\nu}$ проведем с учетом только первого слагаемого в волновой функции непрерывного спектра (10). Как показали детальные исследования, вклад второго слагаемого не вносит изменения в коэффициент поглощения света в широких пределах изменения Ω и H. В этом приближении квадрат матричного элемента $|z_{i\nu}|^2$ принимает вид

$$|z_{i\nu}|^2 = \frac{\sqrt{2\pi}\,(k_z R)^2}{2^n n!} e^{-R^2 k_x^2} \frac{2^5 R^4 H_n^2(Rk_x)}{\zeta(3/2;\ \delta) L_x L_z (2\delta + 2n + k_z^2 R^2)^4}. \tag{21}$$

Как непосредственно следует из (21), $|z_{i\nu}|^2$ при $k_z \to 0$ стремится к нулю; поэтому при расчете коэффициента поглощения света не возникает необходимости учитывать процессы диссипации зонных электронов в квантующем магнитном поле (в (15) можно положить $\Gamma_\nu=0$). Если подставить (21) в (15), то можно получить

$$K(\Omega)_\parallel = K_0 \sum_n \left(-\delta + \frac{\Omega}{\omega_c} - n\right)^{1/2}, \quad -\delta + \frac{\Omega}{\omega_c} \geqslant n, \tag{22}$$

$$K_0 = \frac{2^4 \pi e^2}{\hbar c \sqrt{\varepsilon_0}} \frac{N_s R^2}{\zeta(3/2;\ \delta)} \left(\frac{\hbar\omega_c}{\hbar\Omega}\right)^3.$$

При $H \to 0$ соотношение (22) переходит в (20). На рис. 2 (кривая *2*) приведена частотная зависимость $K(\Omega)_\parallel$. Вычисления проводились при параметрах, близких к Ge (см. выше). Как следует из кривой *2* (рис. 2), высокочастотный пик примесного магнетопоглощения заметно меньше, чем первый пик, который незначительно смещен в длинноволновую область относительно энергии ионизации связанного состояния ($E(H)=$ $=0.6$ мэВ). В случае циркулярно-поляризованного света поведение $K(\Omega)$ от частоты поглощаемого света (необходимо учитывать вклады (18) и (22)) приведено на рис. 2 (кривая *3*) для указанных выше параметров. Как следует из рис. 2, у второго пика магнетопоглощения величина и полуширина несколько меньше, чем у коротковолнового пика. С ростом напряженности магнитного поля расстояние между пиками увеличивается и величина второго пика (относительно первого) уменьшается. Полученные выше особенности поведения $K(\Omega)$ находятся в соответствии с экспериментальными данными работы [5], в которой исследовалось магнетопоглощение неполяризованного света изолированных $D^{(-)}$-центров (примеси Sb в Ge).

Список литературы

[1] Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975. 240 с.
[2] Lucovsky G. // Sol. St. Comm. 1965. V. 3. N 2. P. 299—302.
[3] Андреев С. П., Полунин В. А. // Опт. и спектр. 1987. Т. 62. № 2. С. 219—220.
[4] Перельман Н. Ф., Логвинов И. Н. // ФТТ. 1978. Т. 20. № 4. С. 1045—1051.
[5] Taniguchi Masaki, Narita Shin-ichiro // J. Phys. Jap. 1979. V. 47. N 5. P. 1503—1515.
[6] Демков Ю. Н., Друкарев Г. Ф. // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. № 1. С. 257—260.
[7] Патли Е. // Фотопроводимость. М., 1967. С. 82—155.
[8] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1982. 702 с.
[9] Коровин Л. И., Харитонов Е. В. // ФТТ. 1965. Т. 7. № 7. С. 2162—2173.
[10] Korovin L. I., Kharitonov E. V. // Phys. St. Sol. 1966. V. 14. N 2. P. 445.
[11] Синявский Э. П. Кинетические эффекты в электрон-фононных системах в поле лазерного излучения. Кишинев, 1975. 170 с.

Институт прикладной физики АН МССР
Кишинев

Поступило в Редакцию
26 октября 1988 г.