

РЕЗОНАНСЫ ФАНО В СПЕКТРАХ ПРИМЕСНОГО ФОТОТОКА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ, ЛЕГИРОВАННЫХ МЕЛКИМИ ДОНОРАМИ

*В. Я. Алешкин**, *А. В. Антонов*, *Л. В. Гавриленко***, *В. И. Гавриленко*

*Институт физики микроструктур Российской академии наук
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 1 июня 2005 г.

Построена теория, описывающая пики фототока в спектральной области, соответствующей энергии продольного оптического фонона, для полупроводников, легированных донорами. Проведено сравнение экспериментальных данных для *n*-GaAs с теорией. Получено хорошее согласие теоретических и экспериментальных результатов.

PACS: 63.20.Kr, 71.55.Eq

1. ВВЕДЕНИЕ

Рассмотрим поглощение света электронами в полупроводнике, легированном мелкими донорами, в том случае, когда энергия фотона находится в окрестности энергии продольного оптического фонона. Будем считать температуру достаточно низкой, так что все примесные электроны находятся в основном состоянии донорных центров. В этом случае квант света может быть поглощен двумя способами. Во-первых, происходит поглощение при прямом переходе электрона из основного состояния донора в непрерывный спектр (рис. 1), во-вторых, — переход с поглощением фотона в любое промежуточное состояние электрона, а затем испускание продольного оптического фонона. Отметим, что во втором случае начальное и конечное состояния электрона одинаковы и локализованы около донорного атома. Общая энергия конечного состояния системы электрон + фонон равна энергии состояния электрона в непрерывном спектре, в которое электрон перешел первым способом. Таким образом, имеет место ситуация, соответствующая резонансу Фано [1]. Действительно, электрон может поглотить квант света при переходе либо в состояние непрерывного спектра, либо в состояние дискретного спектра с той же

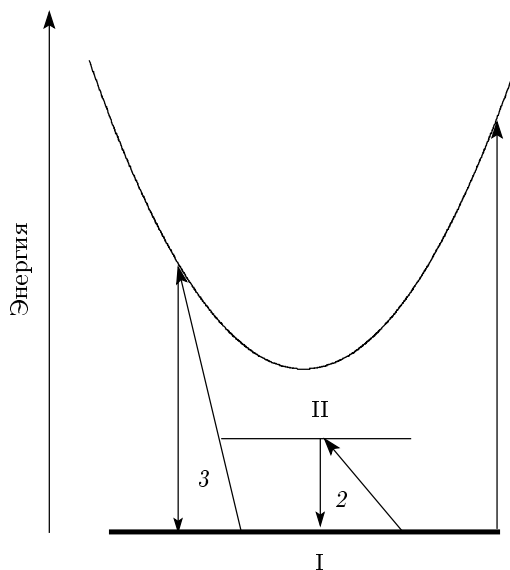


Рис. 1. Схема оптических переходов электрона, находящегося в основном состоянии I донора, при поглощении фотона с энергией, равной $\hbar\omega_0$: 1 — переход в непрерывный спектр; 2, 3 — переходы в резонансное состояние $|\varphi_q\rangle$ через промежуточные состояния соответственно в дискретном и непрерывном спектрах; II — возбужденное состояние

энергией. Интерференция этих двух переходов может приводить к асимметричным пикам в спектре поглощения. Далее мы будем называть эти пики в

*E-mail: aleshkin@ipm.sci-nnov.ru

**E-mail: aritany@ipm.sci-nnov.ru

спектрах поглощения резонансами Фано. Особенности, которые впоследствии были названы резонансами Фано, впервые были обнаружены в кремнии, легированном акцепторами [2] за три года до выхода работы Фано [1]. В работах [3–5] была объяснена природа этих линий, однако количественная теория так и не была создана, поскольку тогда еще не было разработано количественное описание состояний мелких акцепторов в кремнии. Впоследствии резонансы Фано в спектрах поглощения и фототока наблюдались на глубоких донорах в кремнии [6] и недавно в спектрах фототока в полупроводниках GaAs и InP, легированных мелкими донорами [7]. Насколько известно авторам, к настоящему времени отсутствует количественная теория резонансов Фано в полупроводниках, легированных мелкими донорами. Более того, для описания наблюдаемых линий часто пользуются формулами, приведенными в работе Фано [1], полученными для частного случая, когда фазы матричных элементов оператора перехода в непрерывный спектр и на дискретный уровень совпадают [5], или пользуются приближенными формулами из работы [8] (см., например, [7]).

Цель этой работы — построить количественную теорию резонансов Фано в спектре фототока полупроводников, легированных водородоподобными мелкими донорами. В работе получено общее выражение для расчета резонансов Фано в спектрах поглощения, пригодное для описания полупроводников, легированных как донорами, так и акцепторами. Из построенной теории следует, что формулы, приведенные в работе Фано, а также в работе [8], являются в общем случае непригодными для описания рассматриваемого явления. Причина этого состоит в том, что разность фаз матричных элементов электронных переходов в континуум и в локализованное состояние отлична от нуля. Развитая теория находится в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными для GaAs и в несколько худшем для InP.

2. РАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ ПОГЛОЩЕНИЯ КВАНТА СВЕТА

Рассмотрим вероятность перехода электрона в единицу времени под действием света из основного состояния донора в состояние $|\varphi_q\rangle$ (см. рис. 1). В состоянии $|\varphi_q\rangle$ электрон снова находится в основном состоянии донора, но имеется продольный оптический (ЛО) фонон с волновым вектором q . Очевидно, что для описания такого перехода необходимо

рассматривать взаимодействие электрона с фотоном и фононом с точностью до второго порядка теории возмущений. В этом случае процесс перехода электрона из начального состояния в конечное можно разбить на два этапа (см., например, [9]). На первом этапе электрон поглощает фотон и попадает в промежуточное состояние. На втором этапе электрон испускает оптический фонон и попадает в основное состояние донора. Отметим, что закон сохранения энергии выполняется только для всего процесса в целом, но не выполняется на промежуточных этапах. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = H_0 + \bar{V}^{ph} + \bar{V}^{LO}, \quad (1)$$

где слагаемые \bar{V}^{ph} и \bar{V}^{LO} описывают соответственно электрон-фотонное и электрон-фононное взаимодействия, а

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r\kappa_0} \quad (2)$$

— гамильтониан электрона, движущегося в поле донора, p — оператор квазиимпульса электрона, μ — эффективная масса электрона в зоне проводимости, r — радиус-вектор электрона, κ_0 — низкочастотная диэлектрическая проницаемость полупроводника, e — заряд электрона. В дипольном приближении можно написать оператор взаимодействия электрона с циркулярно-поляризованным излучением, падающим в направлении z , в виде

$$\bar{V}^{ph} = \frac{eA(y - ix)}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t} + \text{c.c.}, \quad (3)$$

где A — амплитуда электрического поля электромагнитной волны. Первое слагаемое в выражении (3) описывает поглощение фотона, а второе (комплексно-сопряженное) — испускание. Поскольку мы интересуемся только процессом поглощения фотонов, последнее слагаемое в (3) учитывать не будем.

Оператор взаимодействия электрона с ЛО-фононами имеет вид [10]

$$\bar{V}^{LO} = e\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0}{V\kappa}} \sum_q \frac{i}{q} \exp(-iqr + i\omega_0 t) b_q^\dagger + \text{H.c.}, \quad (4)$$

где V — объем кристалла, q и ω_0 — соответственно волновой вектор и круговая частота ЛО-фонона, $1/\kappa = 1/\kappa_\infty - 1/\kappa_0$, κ_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость, b_q^\dagger — оператор рождения фонона. Первое слагаемое в формуле (4) описывает процесс испускания фононов, а второе — процесс поглощения. Далее нас будет интересовать только первый процесс, поэтому последнее слагаемое в (4)

мы опустим. С учетом сказанного гамильтониан (1) можно представить в упрощенном виде:

$$H = H_0 + V^{ph} \exp(-i\omega t) + V^{LO} \exp(i\omega_0 t), \quad (5)$$

где V^{ph}, V^{LO} — первые слагаемые в выражениях (3) и (4) без зависящих от времени экспонент.

Используя предположение об адиабатическом включении взаимодействия [9] и теорию возмущений, получаем следующее выражение для вероятности перехода электрона из основного состояния донора, которое будем обозначать $|i\rangle$, в состояние $|\varphi_q\rangle$:

$$W_{\varphi i} = \frac{2\pi}{\hbar} |S|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0), \quad (6)$$

где матричный элемент перехода равен

$$S_{\varphi i} = \sum_m \frac{\langle \varphi_q | V^{LO} | m \rangle \langle m | V^{ph} | i \rangle}{\hbar\omega_0 + E_i - E_m + i\lambda}, \quad \lambda \rightarrow 0, \quad (7)$$

E_i — энергия основного состояния донора, m — набор квантовых чисел промежуточных состояний. Все промежуточные состояния можно разделить на две группы: состояния дискретного и непрерывного спектров. Поскольку оператор взаимодействия с фотонами пропорционален сферической функции $Y_{1,1}$,

$$V^{ph} = eAr \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,1}(\theta, \varphi), \quad (8)$$

а волновая функция начального состояния изотропна, промежуточное состояние обладает единичным моментом количества движения и единичной проекцией момента на ось z , т.е. это состояние p -типа. Имея в виду это обстоятельство, все промежуточные состояния непрерывного спектра можно характеризовать только энергией, а состояния дискретного спектра — главным квантовым числом n . Далее будем полагать, что энергия оптического фотона больше энергии ионизации мелкого донора. Тогда выражение (7) можно переписать следующим образом:

$$S_{\varphi i} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\langle \varphi_q | V^{LO} | n \rangle \langle n | V^{ph} | i \rangle}{\hbar\omega_0 + E_i - E_n} + P \int dE \frac{\langle \varphi_q | V^{LO} | \psi(E) \rangle \langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle}{\hbar\omega_0 + E_i - E} + i\pi \langle \varphi_q | V^{LO} | \psi(E_\varphi) \rangle \langle \psi(E_\varphi) | V^{ph} | i \rangle, \quad (9)$$

где $|n\rangle$ — волновая функция промежуточного состояния в дискретном спектре, нормированная на единицу, $|\psi(\varepsilon)\rangle$ — волновая функция донора в непрерывном спектре, нормированная следующим образом:

$$\int d^3r \langle \psi(E) | \psi(E') \rangle = \delta(E - E'),$$

введено обозначение $E_\varphi = \hbar\omega_0 + E_i$, символ «P» указывает на то, что интеграл берется в смысле главного значения.

Если вместо функций $|n\rangle$ ввести функции

$$|\psi(E)\rangle = \sqrt{\delta(E - E_n)} |n\rangle,$$

соответствующие дискретному спектру, но иначе нормированные, то сумму и интеграл в выражении (9) можно записать в виде только интеграла, имеющего такой же вид, как и второе слагаемое в (9). Однако область интегрирования в этом случае должна распространяться и на энергии дискретного спектра. Функции $\psi(E)$, соответствующие дискретному спектру, удовлетворяют тому же условию нормировки, что и функции непрерывного спектра. Для компактности будем использовать такой способ записи в дальнейшем, полагая, что в непрерывном спектре энергия электрона положительна, а энергии дискретного спектра изменяются от E_i до нуля. Такая замена позволяет легко учесть влияние состояний дискретного спектра на взаимодействие резонансных состояний с состояниями непрерывного спектра в рамках теории, развитой Фано [1].

Состояние $|\varphi_q\rangle$ является резонансным, поскольку его энергия соответствует непрерывному спектру, и оно взаимодействует с состояниями $\psi(\varepsilon)$ непрерывного спектра за счет электрон-фононного взаимодействия. Рассматриваемая система в точности соответствует системе, рассмотренной в разд. 5 работы Фано [1], где обсуждается случай взаимодействия нескольких резонансных состояний с состояниями непрерывного спектра. Согласно этой работе, точная волновая функция, соответствующая энергии E , может быть представлена в виде (выражение (46) в работе [1])

$$|\Psi(E)\rangle = \sum_q a_q(E) |\varphi_q\rangle + \int dE' b(E, E') |\psi(E')\rangle, \quad (10)$$

где

$$a_q(E) = -\frac{V_q^*(E)}{E - E_\varphi} \cos[\Delta(E)], \quad (11)$$

$$b(E, E') = -\left[\sum_q \frac{V_q(E') V_q^*(E)}{(E - E')(E - E_\varphi)} + \delta(E - E') \right] \times \cos[\Delta(E)], \quad (12)$$

$$\text{tg}[\Delta(E)] = -\pi \sum_q \frac{|V_q(E)|^2}{E - E_\varphi}, \quad (13)$$

$$V_q^*(E) = \langle \varphi_q | V^{LO} | \psi(E) \rangle.$$

При получении выражений (11)–(13) мы положили

$$F_{q,q'} \equiv P \int dE' \frac{V_q^*(E')V_{q'}(E')}{E - E'} = 0,$$

поскольку недиагональные элементы матрицы $F_{q,q'}$ обращаются в нуль из-за произвольной разности фаз между $V_{q'}$ и V_q^* при усреднении по ансамблю, а диагональные элементы обратно пропорциональны объему системы. Поэтому суммой $\sum_{q'} F_{q,q'}(E) a_{q'}$ в уравнении (49) работы [1] можно пренебречь.

Матричный элемент оператора оптического перехода в состояние $\Psi(E)$ можно представить в следующей форме:

$$\langle \Psi(E) | V^{ph} | i \rangle = \sum_q a_q^*(E) S_{\varphi i} + \int dE' b^*(E, E') \langle \Psi(E') | V^{ph} | i \rangle. \quad (14)$$

С учетом формул (9), (11), (12) выражение (14) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle \Psi(E) | V^{ph} | i \rangle = & -\frac{\cos[\Delta(E)]}{E - E_\varphi} \times \\ & \times \sum_q \left\{ P \int_{E_i}^\infty dE' V_q(E) V_q^*(E') \langle \Psi(E') | V^{ph} | i \rangle \times \right. \\ & \times \left(\frac{1}{E_\varphi - E'} + \frac{1}{E - E'} \right) + \\ & \left. + i\pi V_q(E) V_q^*(E_\varphi) \langle \psi(E_\varphi) | V^{ph} | i \rangle \right\} - \\ & - \cos[\Delta(E)] \langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle. \quad (15) \end{aligned}$$

Воспользовавшись явным выражением для

$$\cos[\Delta(E)] = -\frac{E - E_\varphi}{\sqrt{(E - E_\varphi)^2 + \Gamma^2(E)/4}}, \quad (16)$$

где

$$\Gamma(E) = 2\pi \sum_q |V_q(E)|^2,$$

$\Gamma(E_\varphi)/\hbar$ — вероятность перехода электрона из состояния непрерывного спектра в состояние $|i\rangle$ за счет спонтанного испускания оптического фонона, соотношение (15) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle \Psi(E) | V^{ph} | i \rangle = & \frac{\gamma(E, E_\varphi) \langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle}{\sqrt{(E - E_\varphi)^2 + \Gamma^2(E)/4}} \times \\ & \times \left[\alpha(E) + i\beta(E) + \frac{E - E_\varphi}{\gamma(E, E_\varphi)} \right], \quad (17) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \alpha(E) = & \sum_q P \int_{E_i}^\infty dE' V_q(E) V_q^*(E') \langle \psi(E') | V^{ph} | i \rangle \times \\ & \times \left(\frac{1}{E_\varphi - E'} + \frac{1}{E - E'} \right) \times \\ & \times (\gamma(E, E_\varphi) \langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle)^{-1}, \\ \beta(E) = & \frac{\langle \psi(E_\varphi) | V^{ph} | i \rangle}{\langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle}, \\ \gamma(E, E_\varphi) = & \pi \sum_q V_q(E) V_q^*(E_\varphi). \end{aligned}$$

Выражение (17) является основным результатом данной работы. Отметим, что для его получения нигде не использован явный вид гамильтониана H_0 , поэтому выражение (17) можно применять также для описания полупроводников, легированных акцепторами, и полупроводников с анизотропным законом дисперсии в зоне проводимости.

Если анализировать зависимость квадрата матричного элемента (17) в окрестности энергии E_φ , то можно положить

$$\begin{aligned} \alpha \approx & 4 \sum_q P \int_{E_i}^\infty dE' V_q(E) V_q^*(E') \langle \psi(E') | V^{ph} | i \rangle \times \\ & \times (E_\varphi - E')^{-1} (\Gamma \langle \psi(E_\varphi) | V^{ph} | i \rangle)^{-1}, \quad (18) \\ \beta(E) = & 1, \quad \gamma(E, E_\varphi) \approx \frac{\Gamma(E_\varphi)}{2} = \frac{\Gamma}{2}, \end{aligned}$$

а квадрат модуля матричного элемента (17) записать в виде

$$\begin{aligned} |\langle \Psi(E) | V^{ph} | i \rangle|^2 \approx & \frac{|\langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle|^2}{1 + x^2} |\alpha + i + x|^2 = \\ = & \frac{|\langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle|^2}{1 + x^2} [(\alpha + x)^2 + 1], \quad (19) \end{aligned}$$

где $x = 2(E - E_\varphi)/\Gamma$ — безразмерная энергия.

Выражение (19) является аналогом формулы (21) из работы [1], которая была получена Фано для одиночного резонансного уровня и которая часто используется для описания всплесков фототока вблизи энергий оптического фонона [5, 6]. Если в формуле (21) работы Фано [1] положить параметр q (который не имеет никакого отношения к волновому вектору фонона) равным $\alpha + i$, то из этой формулы получится выражение (19).

Вероятность поглощения кванта света равна

$$\begin{aligned} W(\omega) = & \frac{2\pi}{\hbar} \int dE |\langle \Psi(E) | V^{ph} | i \rangle|^2 \delta(\hbar\omega + E_i - E) = \\ = & \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi(\hbar\omega + E_i) | V^{ph} | i \rangle|^2. \quad (20) \end{aligned}$$

3. РАСЧЕТ РЕЗОНАНСА ФАНО В СПЕКТРЕ ФОТОТОКА ДЛЯ ВОДОРОДОПОДОБНОГО ДОНОРА

Вычислим матричные элементы $\langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle$ и $V_q(E)$ для случая водородоподобного донора, описываемого гамильтонианом (2). Для этого воспользуемся выражением для волновых функций атома водорода. Для удобства будем измерять длину в борзовских радиусах $a_B = \hbar^2 \kappa_0 / \mu e^2$, а энергию в единицах $\epsilon_0 = \mu e^4 / \hbar^2 \kappa_0^2$. В этих переменных волновая функция основного состояния имеет вид [9]

$$|i\rangle = R_{10}(r) Y_{0,0} = 2e^{-r} / \sqrt{4\pi}. \quad (21)$$

Волновые функции промежуточных состояний в дискретном спектре [9] выражаются следующим образом:

$$|n\rangle = R_{n1}(r) Y_{11}(\theta, \varphi) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-2)!}{[(n+1)!]^3}} e^{-r/n} \times \times \frac{2r}{n} L_{n+1}^3\left(\frac{2r}{n}\right) Y_{11}(\theta, \varphi), \quad (22)$$

а в непрерывном спектре [9] —

$$|\psi(E)\rangle = \frac{2}{2\pi(2kr)^2} \sqrt{\frac{1+1/k^2}{1-e^{-2\pi/k}}} \oint dt \times \times e^{2ikrt} \left(t + \frac{1}{2}\right)^{i/k-2} \left(t - \frac{1}{2}\right)^{-i/k-2} Y_{11}(\theta, \varphi), \quad (23)$$

где $L_{n+1}^3(2r/n)$ — обобщенные полиномы Лагерра, а контур интегрирования охватывает точки ветвления $t = \pm 1/2$.

Матричные элементы оператора взаимодействия с электромагнитным излучением можно найти, используя формулу (63.4) из книги Бете и Солпитера [11] для переходов в состояния дискретного спектра. Для вычисления матричного элемента перехода в непрерывный спектр можно воспользоваться методом, изложенным в книге [11, § 71]. Получаются следующие выражения для матричных элементов переходов в дискретный и непрерывный спектры:

$$\frac{\langle n | V^{ph} | i \rangle}{eA} = \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}}, \quad (24)$$

$$\frac{\langle \psi(E) | V^{ph} | i \rangle}{eA} = \sqrt{\frac{1}{1-e^{-2\pi/k}}} \times \times \frac{16}{\sqrt{3}(1+k^2)^{5/2}} \exp\left(-\frac{2}{k} \arctg k\right), \quad (25)$$

где k — волновое число электрона, соответствующее энергии E , измеренное в обратных борзовских радиусах. Для перехода к размерным единицам выражение (24) надо умножить на a_B , а (25) — на $a_B / \sqrt{\epsilon_0}$.

Для вычисления $V_q(E)$, согласно соотношениям (4) и (5), надо вычислить матричный элемент оператора $\exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$. Для этого воспользуемся разложением экспоненты по сферическим гармоникам [9]:

$$e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-i)^l j_l(qr) \times \times Y_{lm}^*\left(\frac{\mathbf{q}}{q}\right) Y_{lm}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\right), \quad (26)$$

где $j_l(x) = \sqrt{\pi/2x} J_{l+1/2}(x)$, $J_{l+1/2}(x)$ — функция Бесселя полуцелого индекса. Для дальнейших вычислений нам понадобится функция

$$j_1(qr) = \frac{\sin^2(qr)}{(qr)^2} - \frac{\cos(qr)}{qr}.$$

Действительно, согласно (13) матричный элемент $V_q = \langle \psi(E) | V^{LO} | \varphi_q \rangle$. Угловая зависимость волновой функции $|\psi(E)\rangle$ от координат электрона пропорциональна $Y_{1,1}$, а волновая функция электрона в состоянии $|\varphi_q\rangle$ сферически-симметрична, поскольку электрон находится в основном состоянии донора. В Приложении показано, что для волновых функций $\psi(E)$ непрерывного спектра имеем

$$\langle \psi(E) | e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle = \frac{i}{k^2 \sqrt{\pi}} \times \times \sqrt{\frac{1+1/k^2}{1-e^{-2\pi/k}}} I(k, q) Y_{1,1}^*\left(\frac{\mathbf{q}}{q}\right), \quad (27)$$

где

$$I(k, q) = -16\pi k^3 \int_0^1 dx x \times \times \text{Im} \left\{ \left(\frac{qx+k-i}{qx-k-i} \right)^{i/k} [(qx-i)^2 - k^2]^{-2} \right\},$$

а для волновых функций n дискретного спектра —

$$\langle n | e^{-iqr} | i \rangle = -i\sqrt{4\pi} I_2(n, q) Y_{11}^*(\mathbf{q}/q), \quad (28)$$

где

$$I_2(n, q) = \int_0^{\infty} dr r^2 R_{n1}(r) R_{1,0}(r) \left[\frac{\sin(qr)}{q^2 r^2} - \frac{\cos(qr)}{qr} \right].$$

Согласно закону сохранения момента импульса, момент испущенного фонона равен моменту поглощенного фотона, поскольку волновые функции электрона в основном и резонансном состояниях одинаковы,

поэтому $V_q \sim Y_{11}^*(\mathbf{q}/q)$.

Используя соотношения (27), (28), а также (4), находим

$$\alpha(E) = \frac{2P \int_0^\infty dk' \frac{\exp\left(-\frac{2}{k'} \arctg k'\right)}{k'^2(1+k'^2)^2(1-e^{-2\pi/k'})} \left(\frac{1}{k_\varphi^2 - k'^2} + \frac{1}{k^2 - k'^2}\right) \int_0^\infty dq I(k, q) I(k', q)}{\frac{\pi}{k_\varphi^3} \sqrt{\frac{1+k_\varphi^2}{(1-e^{-2\pi/k_\varphi})(1-e^{-2\pi/k})}} \frac{\exp\left(-\frac{2}{k} \arctg k\right)}{(1+k^2)^{5/2}} \int_0^\infty dq I(k, q) I(k_\varphi, q)} + \frac{\frac{1}{4} \sum_{n=2}^\infty \sqrt{\frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}} \left(\frac{1}{k_\varphi^2 + 1/n^2} + \frac{1}{k^2 + 1/n^2}\right) \int_0^\infty dq I_2(n, q) I(k, q)}{\frac{1}{k_\varphi^3} \sqrt{\frac{1+k_\varphi^2}{(1-e^{-2\pi/k_\varphi})(1-e^{-2\pi/k})}} \frac{\exp\left(-\frac{2}{k} \arctg k\right)}{(1+k^2)^{5/2}} \int_0^\infty dq I(k, q) I(k_\varphi, q)}, \quad (29)$$

$$\beta(E) = \sqrt{\frac{1-e^{-2\pi/k}}{1-e^{-2\pi/k_\varphi}}} \left(\frac{1+k_\varphi^2}{1+k^2}\right)^{5/2} \times \exp\left(\frac{2}{k_\varphi} \arctg k_\varphi - \frac{2}{k} \arctg k\right), \quad (30)$$

$$\gamma(E, E_\varphi) = \frac{\hbar\omega_0\kappa_0}{(2\pi)^2\bar{\kappa}} \frac{1}{(kk_\varphi)^2} \sqrt{\frac{1+1/k^2}{1-e^{-2\pi/k}}} \times \sqrt{\frac{1+1/k_\varphi^2}{1-e^{-2\pi/k_\varphi}}} \int_0^\infty I(k, q) I(k_\varphi, q) dq. \quad (31)$$

4. СРАВНЕНИЕ ТЕОРИИ И ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ GaAs И InP

Вклад в фототок дают электроны, оказывающиеся после поглощения света в делокализованных состояниях. Поэтому кажется, что для получения спектра фототока необходимо умножить выражение (20) на вероятность оказаться электрону в делокализованном состоянии. Однако, используя соотношение (10) и асимптотическое поведение волновой функции $\psi(E)$ при больших r ($\psi(E) \propto \sin(kr + \delta)$), нетрудно показать, что волновые функции $\Psi(E)$ и $\psi(E)$ при больших r различаются лишь фазой, но не амплитудой (см. вычисления в работе [1] после формулы (4)). Это означает, что электрон в состоянии $\Psi(E)$ является полностью делокализованным,

а взаимодействие с резонансными состояниями не приводит к частичной локализации волновой функции.

Заметное влияние на спектр фототока в области резонанса Фано оказывают частотные зависимости коэффициентов отражения и поглощения света, которые быстро изменяются в этой области спектра из-за поглощения света поперечными оптическими (ТО) фононами. Фототок с учетом этих факторов можно записать в виде

$$J(\omega) = BI(\omega) \frac{W(\omega)}{|A|^2} [1 - R(\omega)] \int_0^d e^{-\eta(\omega)x} dx, \quad (32)$$

где B — некоторая не зависящая от частоты постоянная, $I(\omega)$ — интенсивность падающего на образец света, $\eta(\omega)$ — коэффициент поглощения света, d — толщина легированной области. Поглощение и отражение света в этой области спектра определяются в основном оптическими колебаниями решетки и могут быть описаны с помощью диэлектрической проницаемости в форме [12]

$$\kappa(\omega) = \kappa_\infty + \frac{\kappa_0 - \kappa_\infty}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_{TO}^2} - i \frac{\omega\gamma}{\omega_{TO}^2}}, \quad (33)$$

где ω_{TO} и γ — соответственно частота и постоянная затухания ТО-фонона. Коэффициенты отражения $R(\omega)$ и поглощения $\eta(\omega)$ света имеют вид

$$R(\omega) = \frac{[\operatorname{Re}(\sqrt{\kappa(\omega)}) - 1]^2 + \operatorname{Im}^2(\sqrt{\kappa(\omega)})}{[\operatorname{Re}(\sqrt{\kappa(\omega)}) + 1]^2 + \operatorname{Im}^2(\sqrt{\kappa(\omega)})}, \quad (34)$$

$$\eta(\omega) = \frac{2\omega}{c} \operatorname{Im}(\sqrt{\eta(\omega)}),$$

где c — скорость света.

На рис. 2 приведены рассчитанные и измеренный спектры фототока в области резонанса Фано в образце n -GaAs. Для расчета были использованы следующие параметры GaAs:

$$\mu = 0.0665m_0, \quad \kappa_0 = 12.46, \quad \kappa_\infty = 10.58,$$

$$\hbar\omega_0 = 36.588 \text{ мэВ [13]}, \quad \gamma = 0.001\omega_{TO},$$

$$\omega_{TO} = \omega_0 \sqrt{\kappa_\infty/\kappa_0}$$

m_0 — масса свободного электрона. Один спектр, изображенный сплошной линией, был рассчитан для случая, когда толщина слоя полупроводника, дающая основной вклад в фототок, много меньше $1/\eta(\omega)$. В этом случае вычисление спектра фототока проводилось с использованием выражения (32), в котором интегрирование по x дало величину d . Второй вычисленный спектр, изображенный штриховой линией, был рассчитан в предположении, что толщина полупроводника, из которой собираются фотоэлектроны, много больше $1/\eta(\omega)$. В этом случае интеграл в (32) равен $1/\eta(\omega)$. Очевидно, что спектр фототока

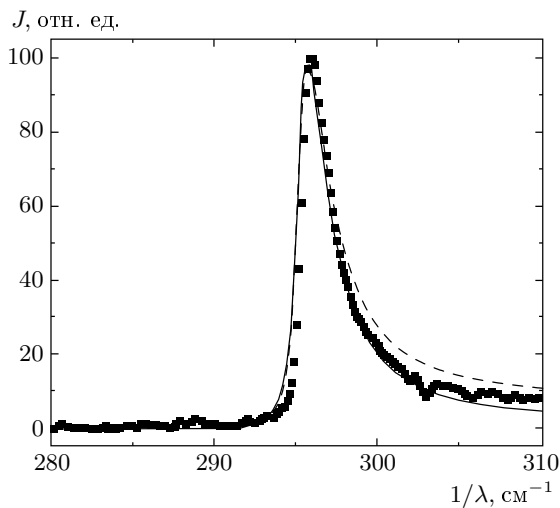


Рис. 2. Рассчитанные (кривые) и измеренный (точки) спектры фототока в n -GaAs при $T = 4.2$ К. Сплошная линия соответствует случаю $\eta d \ll 1$, штриховая — $\eta d \gg 1$. Расчетные спектры были нормированы так, чтобы максимум тока соответствовал 100

для любой толщины d должен располагаться между двумя этими линиями.

Измерения проводились на образце эпитаксиального полупроводника n -GaAs, выращенного на полужолирующей подложке GaAs методом жидкофазной эпитаксии. Эпитаксиальный слой был легирован кремнием с концентрацией $8.3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ и имел толщину 70 мкм. Подвижность электронов при 77 К составила $5.9 \cdot 10^4 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Измерения были проведены на фурье-спектрометре WOMEM при $T = 4.2$ К.

На рис. 2 видно, что наблюдаемый спектр хорошо согласуется с рассчитанным спектром для случая тонкого слоя полупроводника. Характерная величина η в этой области составляет несколько тысяч обратных сантиметров и $\eta d \gg 1$. Отметим, что спектр фототока в GaAs, измеренный в работе [7], отличается от нашего большей асимметрией и значительно хуже согласуется с расчетом.

Расчеты величины $\alpha(E)$ показывают, что вклад в эту величину состояний дискретного спектра в GaAs составляет около 28%. Отметим также, что вычисление спектра фототока с использованием приближенной формулы (19) дает практически те же результаты, что и при использовании точного выражения (17) для n -GaAs. Значения α и Γ , вычисленные с помощью выражения (18), составили

$$\alpha_{\text{GaAs}} = 7.962, \quad \Gamma_{\text{GaAs}} = 0.413 \text{ эВ.}$$

Для того чтобы проиллюстрировать влияние коэффициента отражения на форму резонанса Фано

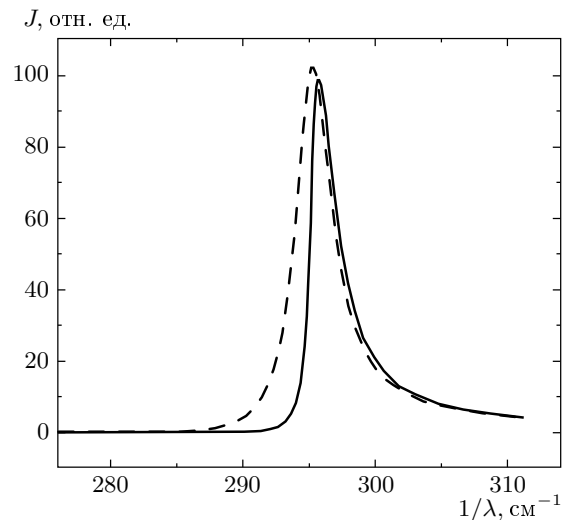


Рис. 3. Рассчитанные спектры фототока в n -GaAs с учетом отражения (сплошная линия) и без учета отражения от кристалла (штриховая линия)

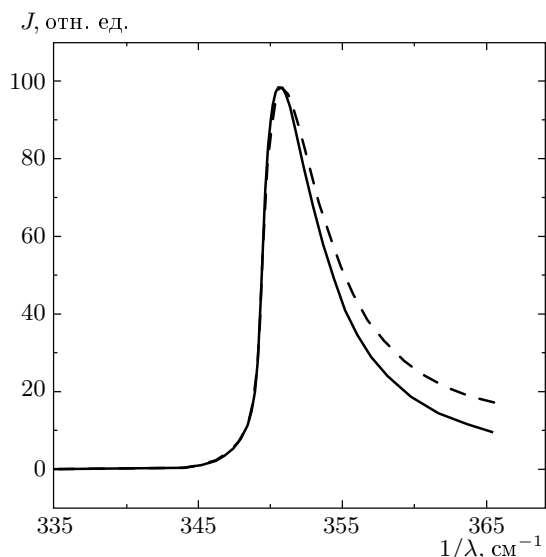


Рис. 4. Рассчитанные спектры фототока в InP. Сплошная линия соответствует случаю $\eta d \ll 1$, штриховая — $\eta d \gg 1$. Спектры были нормированы так, чтобы максимум тока соответствовал 100

в спектре фототока, на рис. 3 приведены рассчитанные спектры фототока для GaAs. На рисунке видно, что учет отражения делает пик более асимметричным и более узким.

На рис. 4 приведены результаты расчета спектра фототока в окрестности резонанса Фано для InP. В расчете использованы следующие параметры:

$$\mu = 0.081m_0, \quad \kappa_0 = 12.2, \quad \kappa_\infty = 9.487,$$

$$\hbar\omega_0 = 43.33 \text{ мэВ} [13],$$

$$\gamma = 0.001\omega_{TO}, \quad \hbar\omega_{TO} = 38.21 \text{ мэВ}.$$

Вычисленное положение пика находится в неплохом согласии с измеренным в работе [7]. Однако полуширина измеренного в [7] пика фототока примерно вдвое меньше рассчитанной. Кроме того, так же как и для GaAs, форма измеренного пика фототока оказывается более асимметричной по сравнению с рассчитанной. Причина расхождений расчетов с результатами измерений, проведенных в [7], как в GaAs, так и в InP остается неизвестной. Отметим, что рассчитанная полуширина резонансного пика фототока в GaAs примерно вдвое меньше, чем в InP, поскольку $\Gamma_{\text{InP}} = 0.852 \text{ мэВ}$. Однако полуширины, измеренные в работе [7], для этих полупроводников примерно одинаковы.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение обсудим вопрос о том, почему в спектрах фототока в *n*-GaAs и *n*-InP резонанс Фано проявляется как пик, а в спектрах фототока и поглощения в *p*-Si — как узкие провалы. Обратим внимание на то, что в материалах GaAs и InP энергии ионизации мелких доноров в пять–шесть раз меньше энергии продольного оптического фонона. Поэтому при поглощении кванта света с энергией оптического фонона электрон оказывается высоко в непрерывном спектре. Вероятность таких переходов невелика, поскольку матричный элемент дипольного момента быстро уменьшается с ростом энергии кванта в этой области, т. е. такой переход почти запрещен. Поэтому вероятности процессов поглощения фотона, которые идут с участием резонансных состояний и имеют второй порядок малости, больше вероятности прямого перехода. Из-за взаимодействия резонансных состояний и состояний непрерывного спектра волновая функция $\Psi(E)$ непрерывного спектра вблизи энергии резонанса содержит в себе волновые функции φ_q резонансных состояний, а также и волновые функции $\psi(E')$. В результате вероятность поглощения фотона с энергией, близкой к энергии оптического фонона, резко увеличивается.

Совершенно другая ситуация имеет место в *p*-Si, легированном бором. Энергия оптического фонона в кремнии составляет около 64 мэВ, а энергия ионизации бора около 45 мэВ, т. е. эти энергии одного порядка. В этом случае резонанс Фано располагается недалеко от максимума вероятности ионизации акцептора, и в этой области вероятность прямого перехода в непрерывный спектр заметно превосходит вероятность перехода как в резонансное состояние, так и в состояния непрерывного спектра с иной энергией. Поэтому «подмешивание» резонансного состояния приводит к уменьшению поглощения и к наблюдению узких провалов как в спектрах фототоков, так и в спектрах поглощения.

Авторы выражают благодарность Б. А. Андрееву за многочисленные обсуждения, которые способствовали появлению этой работы. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 04-02-17178) и Международного научно-технического центра (грант № 2293).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Рассмотрим матричный элемент $\langle \psi(E) | \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle$. Используя выражения для

волновых функций (21), (23) и разложение (26), а также условие ортонормированности сферических функций Y_{lm} , можно получить следующее выражение для этого матричного элемента:

$$\begin{aligned} \langle \psi(E) | \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle = & \\ = -\frac{i}{k^2} \sqrt{\frac{1+1/k^2}{\pi(1-e^{-2\pi/k})}} Y_{1,1}^* \left(\frac{\mathbf{q}}{q} \right) \times & \\ \times \int_0^\infty dr e^{-r} \left[\frac{\sin^2(qr)}{q^2 r^2} - \frac{\cos(qr)}{qr} \right] \times & \\ \times \oint e^{2ikrt} \left(t + \frac{1}{2} \right)^{i/k-2} \left(t - \frac{1}{2} \right)^{-i/k-2} dt. & \quad (\text{П.1}) \end{aligned}$$

Интеграл по r легко вычисляется:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr e^{-r+2ikrt} \left[\frac{\sin(qr)}{q^2 r^2} - \frac{\cos(qr)}{qr} \right] = & \\ = \frac{1}{q} \left\{ 1 + \frac{1-2ikt}{q} \left[\arctg \left(\frac{1-2ikt}{q} \right) - \frac{\pi}{2} \right] \right\}. & \quad (\text{П.2}) \end{aligned}$$

Интеграл по контуру, получающийся с использованием выражения (П.2), можно вычислить только численно. Но для численного счета он неудобен из-за резких всплесков подынтегральной функции. Чтобы привести его к удобному для численного вычисления виду, представим выражение (П.2) в интегральном виде, который позволяет провести интегрирование по контуру:

$$\begin{aligned} \frac{1}{q} \left\{ 1 + \frac{1-2ikt}{q} \left[\arctg \left(\frac{1-2ikt}{q} \right) - \frac{\pi}{2} \right] \right\} = & \\ = \frac{1}{q} \left[1 - \left(\frac{1-2ikt}{q} \right)^2 \int_0^1 \frac{dx}{x^2 + (1-2ikt)^2/q^2} \right]. & \quad (\text{П.3}) \end{aligned}$$

Интеграл по контуру с использованием правой части выражения (П.3) может быть вычислен по теории вычетов. Для этого контур интегрирования полагается кругом с бесконечным радиусом и находятся вычеты в двух полюсах, в которых сумма $x^2 + (1-2ikt)^2/q^2$ обращается в нуль. Интеграл по контуру от первого слагаемого в квадратных скобках в правой части выражения (П.3) равен нулю. Если обозначить

$$\begin{aligned} I(k, q) = \frac{1}{q} \oint dt \left(t + \frac{1}{2} \right)^{i/k-2} \left(t - \frac{1}{2} \right)^{-i/k-2} \times & \\ \times \left[1 + \left(\frac{1-2ikt}{q} \right)^2 \int_0^1 \frac{dx}{x^2 + (1-2ikt)^2/q^2} \right] = & \\ = -16\pi k^3 \int_0^1 dx x \times & \\ \times \text{Im} \left\{ \left(\frac{qx+k-i}{qx-k-i} \right)^{i/k} [(qx-i)^2 - k^2]^{-2} \right\}, & \quad (\text{П.4}) \end{aligned}$$

то интеграл в правой части выражения (П.4) хорошо вычисляется численно. Используя (П.4), получаем выражение (27).

ЛИТЕРАТУРА

1. U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
2. H. J. Hrostowski and R. H. Kaiser, J. Phys. Chem. Sol. **4**, 148 (1958).
3. A. Onton, P. Fisher, and A. K. Ramdas, Phys. Rev. **163**, 686 (1967).
4. H. R. Chandrasekhar, A. K. Ramdas, and S. Rodriguez, Phys. Rev. B **14**, 2417 (1976).
5. G. D. Watkins and W. B. Fowler, Phys. Rev. B **16**, 4524 (1977).
6. E. Janzen, G. Grossmann, R. Stedman et al., Phys. Rev. B **31**, 8000 (1985).
7. K. Jin, J. Zhang, Z. Chen et al., Phys. Rev. B **64**, 205203 (2001).
8. М. В. Клейн, в сб. *Рассеяние света в твердых телах*, под ред. М. Кардоны, Мир, Москва (1979).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
10. В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984).
11. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, Москва (1960).
12. П. Ю. М. Кардона, *Основы физики полупроводников*, Физматлит, Москва (2002).
13. W. J. Moore and R. T. Holm, J. Appl. Phys. **80**, 6939 (1996).
14. A. Dargys and J. Kundrotas, *Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs, and InP*, Science and Encyclopedia Publishers, Vilnius (1994).