

Влияние ближнего поля на спектр поглощения примесей в кристаллах

В. Я. Алешкин¹⁾, Л. В. Гавриленко

Институт физики микроструктур РАН, 603950 Н.Новгород, Россия

Поступила в редакцию 16 мая 2014 г.

После переработки 23 мая 2014 г.

В работе рассмотрено влияние ближнеполюного взаимодействия мелких доноров в GaAs на спектр внутрицентрального примесного поглощения. Показано, что ближнеполюное взаимодействие приводит к уширению линии поглощения, которое увеличивается с ростом концентрации доноров. Форма линии поглощения перестает быть лоренцевой: ее коротковолновое крыло становится более протяженным по сравнению с длинноволновым крылом.

DOI: 10.7868/S0370274X1412008X

Переходы между локализованными состояниями примеси можно полагать дипольными, т.е. с точки зрения электродинамики поле, которое генерируют такие переходы на расстояниях, больших борновского радиуса, может рассматриваться как поле колеблющегося диполя. Хорошо известно, что электрическое поле колеблющегося диполя имеет три слагаемых [1].

В работе [2] было показано, что ближнеполюные слагаемые существенно изменяют спектр поглощения димера, который представляет собой два близко расположенных атома. Возникает закономерный вопрос о влиянии этих слагаемых на спектр примесного поглощения. Изучению данного вопроса и посвящена настоящая работа. На примере $1s$ - $2p$ -перехода мелких доноров в GaAs показано, что ближнеполюные слагаемые приводят к уширению линии поглощения и к нелоренцевой форме этой линии.

Будем рассматривать примеси как совокупность (газ) случайно расположенных диполей. Обозначим через \mathbf{d}_i амплитуду колебания диполя, находящегося в точке с радиусом-вектором \mathbf{r}_i . Электрическое поле, создаваемое в точке с радиусом-вектором \mathbf{r}_j диполем, находящимся в точке с радиусом-вектором \mathbf{r}_i и осциллирующим с циклической частотой ω , равно [1]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \exp(ik|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \left\{ \frac{k^2 [(\mathbf{n}_{ij} \mathbf{d}_i) \mathbf{n}_{ij}]}{\varepsilon |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} + \right. \\ \left. + \frac{(3\mathbf{n}_{ij}(\mathbf{n}_{ij} \mathbf{d}_i) - \mathbf{d}_i)}{\varepsilon} \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} - \frac{ik}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^2} \right) \right\} = \\ = \hat{T}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \mathbf{d}_i, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mathbf{n}_{ij} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)/|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$, ε – диэлектрическая проницаемость среды, $k = \sqrt{\varepsilon}\omega/c$ – величина волнового вектора в среде, c – скорость света, $\hat{T}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$ – оператор, введенный для удобства.

Пусть на систему падает электромагнитная волна, распространяющаяся вдоль направления z , электрическое поле которой есть $\mathbf{E}_0 \exp(ikz - i\omega t)$. Поле в точке расположения j -го диполя равно сумме внешнего поля и поля создаваемого всеми остальными диполями:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_j = \mathbf{E}_0 \exp(ikz_j) + \sum_{l \neq j} \mathbf{E}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_l) = \\ = \mathbf{E}_0 \exp(ikz_j) + \sum_{l \neq j} \hat{T}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l) \mathbf{d}_l. \end{aligned} \quad (2)$$

Используя (2), можно получить следующее выражение для \mathbf{d}_j :

$$\mathbf{d}_j = \alpha_0 \mathbf{E}_j = \alpha_0 \mathbf{E}_0 \exp(ikz_j) + \alpha_0 \sum_{l \neq j} \hat{T}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l) \mathbf{d}_l, \quad (3)$$

где α_0 – восприимчивость одного диполя. Для восприимчивости диполя в области частот, близкой к частоте $1s$ - $2p$ -перехода, будем использовать известное выражение для восприимчивости двухуровневой системы [3]:

$$\alpha_0 = \frac{2|d|^2}{\hbar} \frac{\omega_0 \Delta}{\omega_0^2 - \omega^2 + 1/\tau^2 - 2i\omega/\tau}, \quad (4)$$

где ω_0 – циклическая частота $1s$ - $2p$ -перехода, d – матричный элемент оператора этого дипольного перехода, τ – время релаксации фазы, Δ – разность населенностей нижнего и верхнего состояний. Неоднородным уширением спектра поглощения примеси мы пренебрегаем.

¹⁾e-mail: aleshkin@ipmras.ru

Для нахождения эффективной восприимчивости диполя $\alpha_{\text{eff}} = d_j/E_0 \exp(ikz_j)$ система линейных неоднородных уравнений (3) решалась численно для 2000 доноров, случайным образом разбросанных в сфере радиуса R . Для исследования зависимости эффективной восприимчивости от концентрации изменялся радиус R при сохранении полного числа диполей. После нахождения α_{eff} каждого диполя вычислялась средняя восприимчивость по ансамблю. Для увеличения точности вычисления производилось усреднение α_{eff} по 30 реализациям положений доноров. Уменьшение числа диполей на 500 изменяло результат на несколько процентов ($\sim 5\%$).

Для $1s-2p$ -перехода мелкого донора в GaAs $\hbar\omega_0 = 4.37$ мэВ. Низкочастотная диэлектрическая проницаемость GaAs полагалась равной $\epsilon = 12.46$, а ширина линии $\hbar\tau^{-1} = 10^{-4}\hbar\omega_0$. Полупроводник считался некомпенсированным, а температура такой, при которой электроны занимают нижний донорный уровень ($\Delta = 1$). Поэтому ширина линии поглощения определялась рассеянием на акустических фононах. На рис. 1 приведены рассчитанные спектры мнимой

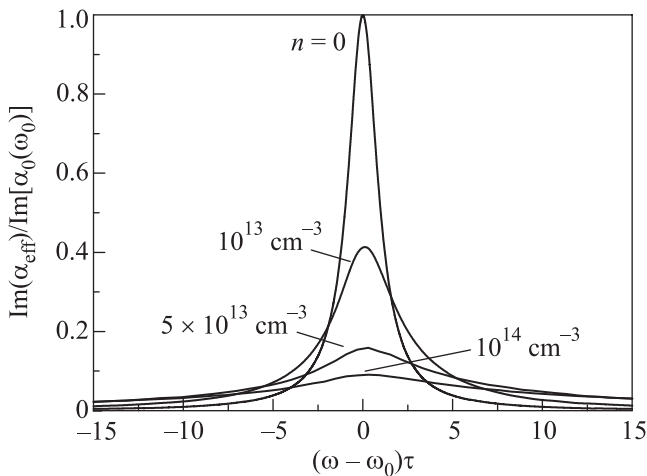


Рис. 1. Спектры мнимой части эффективной восприимчивости доноров в GaAs для трех концентраций. Линия $n = 0$ соответствует восприимчивости отдельного донора

части эффективной восприимчивости, которая определяет поглощение, для нескольких концентраций доноров ($n = 10^{13}, 5 \cdot 10^{13}, 10^{14} \text{ см}^{-3}$). Видно, что с ростом n величина максимума поглощения уменьшается, а ширина линии увеличивается. При удалении из выражения для поля, создаваемого диполем (из оператора \hat{T}), ближнепольных слагаемых спектр линии поглощения в рассматриваемом интервале концентраций от n не зависит. Поэтому можно заключить, что изменение спектра поглощения обусловлено ближнепольными компонентами поля.

На рис. 2 приведены зависимости обратной величины максимума поглощения (т.е. $\alpha_{\text{eff}}(\omega_0)$) и ширины

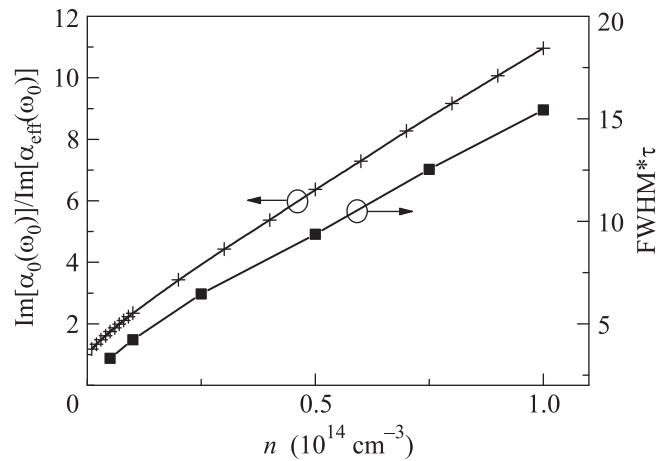


Рис. 2. Зависимости обратной величины максимума поглощения и ширины линии на половине максимума поглощения от концентрации доноров

ны линии на половине максимума поглощения от концентрации. Для расчета максимума поглощения использовалось усреднение по 64 реализациям диполей. Это обеспечивало точность около процента, т.е. результаты различных расчетов после усреднения отличались на величину порядка процента. Из рисунка видно, что данная зависимость близка к линейной.

На рис. 3 приведен рассчитанный спектр эффективной восприимчивости для концентрации доноров

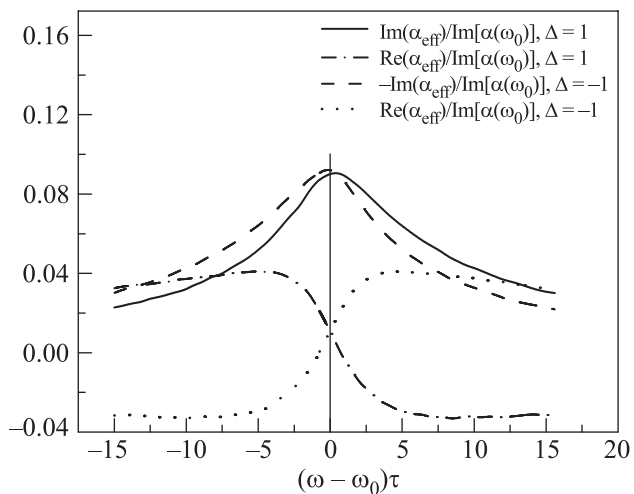


Рис. 3. Спектры эффективных восприимчивостей доноров в GaAs с концентрацией $n = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ для $\Delta = 1$ и -1 . Мнимая часть для случая $\Delta = -1$ приведена со знаком минус

10^{14} см^{-3} . Хорошо видно, что спектр мнимой части восприимчивости, которая определяет поглоще-

ние (усиление при $\Delta = -1$), несимметричен относительно $\omega = \omega_0$. В случае $\Delta = 1$ поглощение на коротковолновом крыле линии больше, чем на длинноволновом. Для случая $\Delta = -1$ усиление на длинноволновом крыле больше, чем на коротковолновом. С ростом концентрации доноров n увеличивается отклонение формы линии поглощения от лоренцевой.

До сих пор мы рассматривали маленький шар с примесями, полагая поле \mathbf{E}_0 внешним. Однако если этот шар окружает такой же полупроводник, то в \mathbf{E}_0 вносит вклад поляризация окружающих данную сферу примесей. Таким образом \mathbf{E}_0 – это поле, которое существовало бы в полупроводнике, если бы из него удалили рассматриваемую сферу. Из теории электричества известно, что \mathbf{E}_0 связано со средним полем в полупроводнике следующим образом [4]:

$$\mathbf{E}_0 = \mathbf{E} + \frac{4\pi}{3}\mathbf{P}, \quad (5)$$

где \mathbf{E} – среднее поле в полупроводнике, а \mathbf{P} – поляризация единицы объема.

Учет указанного обстоятельства приводит к формуле, аналогичной формуле Лоренца–Лоренца для эффективной восприимчивости системы [5]:

$$\alpha = \frac{\alpha_{\text{eff}}}{1 - \frac{4\pi}{3}n\alpha_{\text{eff}}}, \quad (6)$$

с той лишь разницей, что в формуле Лоренца–Лоренца вместо α_{eff} фигурирует α_0 . Как известно, формула Лоренца–Лоренца не описывает адекватно восприимчивость газа вблизи резонансных полос по-

глощения [5]. Возможно, одной из причин этого служит рассмотренное явление, которое приводит к замене в данной формуле α_0 на α_{eff} .

В заключение перечислим основные результаты работы. Ближнепольные компоненты приводят к уширению линии примесного поглощения, уменьшению максимума поглощения и делают спектр резонансного поглощения нелоренцевым. Отметим, что рассмотренный механизм изменения спектра поглощения имеет место и в одноатомных газах. Наблюдение предсказанного уширения спектра представляется нетривиальной задачей, поскольку его величина невелика (при концентрации $n = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ширина линии составляет около 6 мкэВ) и поскольку существуют другие механизмы уширения уровней (например, за счет компенсации), на фоне которых данный механизм заметить непросто.

Авторы признательны В.В. Курину за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект # 14-02-00635-а).

-
1. Дж. Джексон, *Классическая электродинамика*, Мир, М. (1965).
 2. О. Н. Гадамский, И. В. Гадамская, К. К. Алтуни, Письма в ЖЭТФ **90**, 266 (2009).
 3. Л. Аллен, Дж. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, М. (1978).
 4. И. Е. Тамм, *Основы теории электричества*, Физматлит, М. (2003).
 5. *Физический энциклопедический словарь*, Советская энциклопедия, М. (1984).