

Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

Z. P. Sinyavskii, N. N. Syrbu, V. N. Chebotar,  
Inverse Hydrogen-Like  
Series in Impure Semiconductors, *Fizika i Tekhnika  
Poluprovodnikov*, 1986, Volume 20, Issue 8, 1481–  
1484

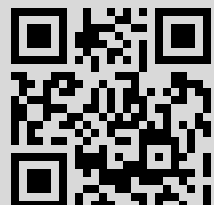
Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that  
you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 178.168.20.213

December 30, 2020, 19:25:08



ОБРАТНАЯ ВОДОРОДОПОДОБНАЯ СЕРИЯ  
В ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Сивявский Э. П., Сырбу Н. Н., Чеботарь В. Н.

Изучено влияние примесных центров различных зарядовых состояний на механизмы образования обратных водородоподобных серий (ОВС) в полупроводниках. Теоретически и экспериментально исследовано поглощение света в области ОВС в кристалле  $\text{BiJ}_3$ .

Для интерпретации спектров типа обратной водородоподобной серии (ОВС) в полупроводнике  $\text{BiJ}_3$  использовалась модель биэлектрона [1, 2]. Появление еще одного материала ( $\text{ZnP}_2$ ), в котором наблюдалась ОВС [3], стимулировало введение понятия биэлектронно-примесного комплекса (БПК) [4, 5]. Оба подхода развиты в приближении сферических зон, и наличие зоны проводимости с отрицательной эффективной массой является необходимым. Соответствующая зонная схема представлена на рис. 1, где  $c_1$  и  $c_2$  — зоны проводимости противоположной кривизны, разделенные энергетическим зазором  $E_0$  (для масс введем обозначения  $m_{c_1} \equiv m_1 > 0$ ,  $m_{c_2} \equiv -m_2 < 0$ ),  $v$  — валентная зона,  $E_g$  — ширина запрещенной зоны,  $Ry = \mu e^4 / 2\hbar^2 \epsilon^2$  — биэлектронный ридберг,  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ ,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость среды; показано также состояние локального центра  $D$  глубиной  $\epsilon_g$ .

В данной работе исследуются другие возможные механизмы образования ОВС с учетом различных зарядовых состояний локальных центров.

1. Рассмотрим БПК — биэлектрон в поле положительно заряженного локального центра. Такой комплекс может быть получен фотопереходом из примесных состояний, для описания которых обычно используются вариационные функции локальных центров типа  $\text{He}$  и  $\text{H}^{(-)}$  [4, 5]. Особенность спектра поглощения БПК состоит в том, что каждой линии ОВС сопутствует прямая водородоподобная серия (ПВС). Вычислим  $K(\omega)$  — коэффициент поглощения света частоты  $\omega$ , обусловленный фотопереходами на уровни ОВС БПК из основного состояния примесного центра типа отрицательного иона водорода  $\text{H}^{(-)}$  [4], как функцию главного квантового числа  $n$ .

Для этого воспользуемся выражением (см., например, [6])

$$K(\omega) = \frac{2\pi c^2 \hbar^2}{V \omega \epsilon} \sum_{i, f} w_{if} n_i (1 - n_f) \delta(E_f - E_i). \quad (1)$$

Здесь  $i, f$  — символы начального и конечного состояний с энергиями  $E_i, E_f$  и функциями распределения  $n_i, n_f$ ;  $c$  — скорость света в вакууме,  $V$  — объем основной области кристалла,

$$w_{if} = 4 \sqrt{\epsilon} \frac{e^2}{\hbar c} \left| \frac{P_{12}}{m_0} \right|^2 \frac{\omega}{c^2} |M_{if}|^2, \quad (2)$$

$$M_{if} = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 F_i^*(r_1, r_2) F_f(r_1, r_2), \quad (3)$$

$m_0$  — масса свободного электрона,  $P_{12}$  — межзонный матричный элемент оператора импульса,  $e$  — заряд электрона,  $r_1, r_2$  — координаты электронов рассматри-

ваемой двухчастичной задачи. Вариационная функция начального состояния имеет вид [4]

$$F_f(r_1, r_2) = A (e^{-\alpha_1 r_1 - \alpha_2 r_2} + e^{-\alpha_1 r_2 - \alpha_2 r_1}), \quad (4)$$

$A$  — нормировочная константа,

$$\alpha_1 = a x_0, \quad \alpha_2 = b x_0, \quad \alpha_0 = m_1 e^2 / \hbar \epsilon, \quad (5)$$

$a = 1.039$ ,  $b = 0.283$  — вариационные параметры задачи  $H^{(-)}$  [7]. Конечное состояние  $F_f(r_1, r_2)$  выбиралось аналогично [5]. Для  $K(n)$  в максимумах поглощения, соответствующих линиям ОВС, получено

$$K(n) = K_0 \Phi(n, \Theta), \quad (6)$$

$$\Phi(n, \Theta) = \left( \frac{\Theta}{1 + \Theta} \right)^2 \left( 1 + \frac{\epsilon_s}{E_0} + \frac{1}{n^2} \frac{Ry}{E_0} \right)^{-1} \left\{ \frac{(s_1 - 1)^{n-2}}{(s_1 + 1)^{n+2}} \left[ s_2 (s_1 - n) + \frac{2s_1 s_2}{s_1^2 - s_2^2} (s_1^2 - 1) \right] + \frac{(s_2 - 1)^{n-2}}{(s_2 + 1)^{n+2}} \left[ s_1 (s_2 - n) + \frac{2s_1 s_2}{s_2^2 - s_1^2} (s_2^2 - 1) \right] \right\}^2, \quad (7)$$

$$K_0 = \frac{2^9 \pi e^2 E_0}{\sqrt{\epsilon} \hbar c Ry} N_s r_{12}^2 f(a, b).$$

Здесь  $\Theta = m_1 / \mu$ ,  $f(a, b) = (4ab)^3 (a+b)^3 / [(a+b)^6 + (4ab)^3] (a-b)^4 \approx 1.25$ ,  $s_1 = na\Theta$ ,  $s_2 = nb\Theta$ ,  $N_s$  — концентрация центров,  $er_{12}$  — межзонный дипольный

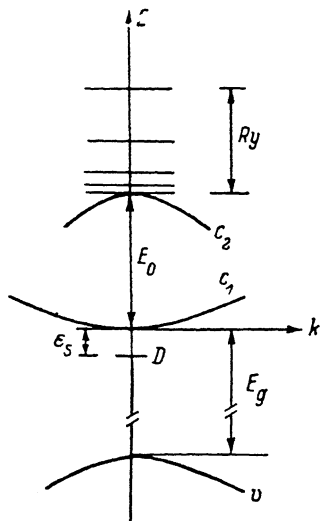


Рис. 1. Зонная схема полупроводников, в которых реализуются биэлектронные состояния.

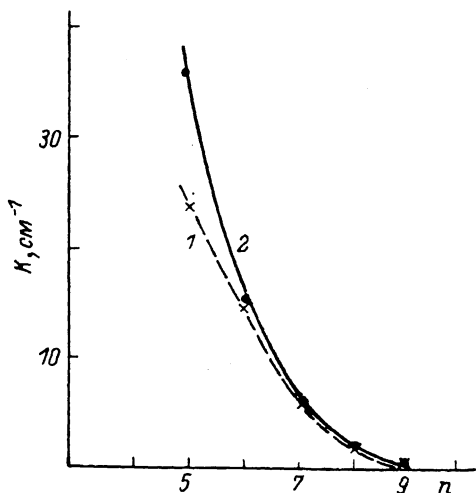


Рис. 2. Рассчитанная (1) и экспериментальная (2) зависимости коэффициента поглощения от главного квантового числа ОВС.

матричный элемент ( $|E_0 r_{12} / \hbar|^2 = |p_{12} / m_0|^2$ ). Для оценок использовались следующие значения параметров кристалла  $ZnP_2$ :  $E_0 = 1.6$  эВ,  $Ry = 0.73$  эВ,  $\epsilon_s = 0.1$  эВ,  $\epsilon = 10$ ,  $\mu = 5.4 m_0$ . Оказалось, что для  $\Theta = 0.12$  функция  $\Phi(n, \Theta)$  наиболее близко к эксперименту описывает зависимость коэффициента поглощения от  $n$ . На рис. 2 показаны теоретическая (1) и экспериментальная (2) зависимости  $K(n)$ . Отсчет производился от 10-го пика  $K_{\text{вкс}}(10) \approx 2 \text{ см}^{-1}$ . Эксперимент выполнен при 77 К для конфигурации  $E_1 C_2$  ( $C_2$  — ось второго порядка моноклинного кристалла симметрии  $C_{2h}^5$ ,  $E$  — напряженность поля электромагнитной волны). Результат приведен для одного из образцов  $n$ -типа с концентрацией носителей  $N = 5.7 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , толщиной  $d = 825 \text{ мкм}$ . Отклонения при малых  $n$  связаны с выходом за пределы применимости континуального приближения для состояний малого радиуса (для  $ZnP_2$  первый боровский радиус биэлектрона порядка 1 Å). В результате сопоставления абсолютной величины коэффициента поглощения получилось  $N_s r_{12}^2 \approx 2 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$ , что реализуется, например, для

следующей разумной пары значений:  $N_s = 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $r_{12}^2 = 4 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ . Получено также, что поглощение в области ПВС (эта серия описывается квантовым числом  $m$  при фиксированном  $n$ ) убывает с ростом  $m$ , что качественно согласуется с экспериментом.

2. Исследуем одноэлектронную модель ОВС. Пусть в кристалле с зонной структурой, изображенной на рис. 1, имеются двукратно отрицательно заряженные примесные центры  $D^{(-)}$ .

Если при фотовозбуждении центра один из электронов переходит в зону  $c_2$ , то образующаяся система с учетом взаимодействия зонного электрона со ставшим однократно заряженным центром  $D^{(-)}$  описывается уравнением

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla^2 + \frac{e^2}{\epsilon r} \right) \psi(r) = (E - E_0) \psi(r), \quad (8)$$

которое имеет следующие собственные значения:

$$E = E_0 + \frac{Ry^{(0)}}{n^2}, \quad Ry^{(0)} = \frac{m_2 e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}. \quad (9)$$

Эта модель образования ОВС впервые была предложена в [1]. Рассмотрим оптические переходы в такой системе. Коэффициент поглощения света можно записать в виде

$$K(\omega) = \frac{4\pi}{\sqrt{\epsilon}} \frac{e^2}{\hbar c} \left| \frac{p_{12}}{m_0} \right|^2 \frac{N_s}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\Gamma t + i \frac{t}{\hbar} (E_0 + \epsilon_s + \frac{Ry^{(0)}}{n^2} - \hbar\omega)} \left| \int d^3r \psi_i^*(r) \psi_f(r) \right|^2. \quad (10)$$

Здесь  $\Gamma$  — феноменологическая константа затухания возбужденного электронного состояния. Слабосвязанный электрон локального центра  $D^{(-)}$  будем описывать простейшей вариационной функцией  $\psi_i(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r}$ . Волновая функция конечного состояния представляет собой решение уравнения (8). Для  $s$ -волны имеем

$$\psi_f(r) = (\pi n^5 a_2^3)^{-1/2} e^{-r/n a_2} L_{n-1}^1 \left( \frac{2r}{n a_2} \right),$$

где  $a_2 = \hbar^2 \epsilon / m_2 e^2$ ,  $L_{n-1}^1(x)$  — полином Лагерра. В исследуемой модели

$$\int d^3r \psi_i^*(r) \psi_f(r) = (\alpha^3 a_2^3 n^5)^{1/2} \frac{2^3 (\alpha a_2 - 1) (\alpha_2 n - 1)^{n-2}}{(\alpha a_2 n + 1)^{n+2}}. \quad (11)$$

В результате выражение для  $K(\omega)$  может быть записано в виде (для простоты будем считать, что  $Ry^{(0)}/n^2 \ll E_0$ )

$$K(\omega) = K_0 \frac{n^5 (\xi - 1)^2 (n\xi - 1)^{2n-4}}{(\xi n + 1)^{2n+4}} \xi^3, \quad (\xi \equiv \alpha_2), \quad (12)$$

$$K_0 = \frac{2^9 \pi}{\sqrt{\epsilon}} \frac{e^2}{\hbar c} N_s r_{12}^2 \frac{E_0}{\hbar \omega} \frac{E_0}{\hbar} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + \hbar^{-2} (E_0 + \epsilon_s - \hbar\omega)^2}. \quad (13)$$

Если  $\xi > 1$ ,  $K(\omega)$  является убывающей функцией  $n$  [при  $n\xi \gg 1$ ,  $K(\omega) \sim \sim n^{-3}$ ]. На рис. 3 приведена зависимость  $K(\omega)/K_0$  от  $n$  при  $\xi = 2$ . Для типичных значений параметров  $N_s = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $\epsilon = 10$ ,  $\Gamma = 4.8 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ ,  $r_{12} = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ ,  $E_0 + \epsilon_s = \hbar\omega = 1 \text{ эВ}$  получаем  $K(\omega) \simeq 10^2 \text{ см}^{-1}$ . Результат (12) качественно соответствует спектру типа ОВС в  $\text{BiJ}_3$  [1, 2], где поглощение монотонно спадает с ростом  $n$  (расчет в биэлектронной модели [3] показывает, что интенсивность линий поглощения является немонотонной функцией  $n$ ). Заметим, что данный механизм не накладывает ограничений на абсолютную величину  $m_2$ , тогда как для существования двухзонного биэлектрона необходима положительность трансляционной массы  $M = m_1 - m_2 > 0$ .

3. Рассмотрим биэлектрон — двухэлектронное образование носителей, находящихся в зонах  $c_1$  и  $c_2$ , связанных кулоновским взаимодействием. В качестве начальных выберем два типа состояний: а) два носителя в зоне  $c_1$ , один

из которых фотовозбуждается в зону  $c_2$ ; б) один электрон в зоне  $c_1$ , а другой переходит в зону  $c_2$  из локального центра  $D^{(-)}$ , который в результате становится нейтральным. Отношение коэффициентов поглощения для случаев а и б имеет вид

$$\frac{K_a}{K_b} \sim \frac{N}{N_s} \left( \frac{\pi \hbar^2 \alpha^2}{2m_1 k_0 T} \right)^{3/2}. \quad (14)$$

Здесь  $N$  — концентрация носителей в зоне  $c_1$ ,  $\alpha$  — вариационный параметр, величина порядка обратного радиуса локального центра  $D^{(-)}$ . Соотношение (14) определяет условие для температуры и концентрации примеси, при которых второй механизм образования биэлектрона становится конкурентоспособным с обычным механизмом [2].

В заключение отметим, что учет локальных центров различного зарядового состояния значительно увеличивает интерпретационные возможности биэлектронной модели. Полученное соответствие эксперимента по поглощению в  $ZnP_2$  в области ОВС с расчетом в биэлектронно-примесной модели позволяет надеяться, что именно такие комплексы реализуются в данном материале. Одноэлектронная модель ОВС также возможна только в примесном полупроводнике.

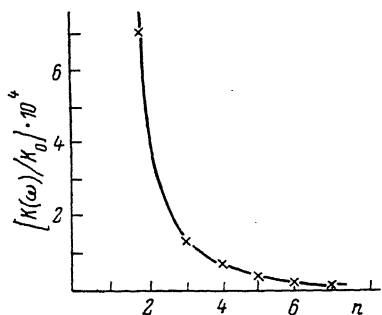


Рис. 3. Зависимость коэффициента поглощения света от главного квантового числа в одноэлектронной модели ОВС.

Чтобы ОВС попадала в полосу прозрачности кристалла, необходимо условие  $Ry + E_0 + \epsilon_s < E_g$ . По-видимому, это условие жесткое: сейчас имеется два материала ( $BiJ_3$ ,  $ZnP_2$ ), где наблюдались спектры, сходящиеся в длинноволновую область.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Гросс Е. Ф., Перель В. И., Шехмаметьев В. И. Обратная водородоподобная серия при оптическом возбуждении легких заряженных частиц в кристалле иодистого висмута ( $BiJ_3$ ). — Письма ЖЭТФ, 1971, т. 13, в. 6, с. 320—325.
- [2] Гросс Е. Ф., Старостин Н. В., Шехмаметьев Р. И. Излучение биэлектрона и бихола в кристалле иодистого висмута. — ФТТ, 1971, т. 13, в. 11, с. 3393—3397.
- [3] Селькин А. В., Стамов И. Г., Сырбу Н. Н., Уманец А. Г. Обратная водородоподобная серия в оптических спектрах кристаллов  $ZnP_2$ . — Письма ЖЭТФ, 1982, т. 35, в. 2, с. 51—53.
- [4] Жилич А. Г., Шещилов М. П., Старостин Н. В. К теории биэлектронно-примесных комплексов в полупроводниках. — ФТТ, 1983, т. 25, в. 5, с. 1343—1347.
- [5] Kovarskii V. A., Sinyavskii E. P., Chernysh L. V. — Phys. St. Sol. (b), 1984, v. 123, p. 671—677.
- [6] Леванюк А. П., Осипов В. В. Краевая люминесценция прямозонных полупроводников. — УФН, 1981, т. 133, в. 3, с. 427—477.
- [7] Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., 1960. 562 с.
- [8] Старостин Н. В., Шещилов М. П. Биэлектронное поглощение света в полупроводниках. — УФЖ, 1980, т. 25, в. 10, с. 1707—1711.