

УДК 537.611

© 1992

## ДВУМЕРНЫЕ ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫЕ ДОНОРЫ $D^-$ В УЛЬТРАКВАНТОВОМ РЕЖИМЕ СИЛЬНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

А. Б. Дзюбенко

В пределе сильного магнитного поля получены энергии связи двумерных (2D) отрицательно заряженных доноров  $D^-$ , содержащих два электрона в синглетном или триплетном состоянии на нулевом и первом уровнях Ландау (УЛ). Показано, что энергии переходов при поглощении инфракрасного кванта, возбуждающего один электрон с нулевого на первый УЛ, оказываются значительно больше энергий связи  $D^-$ , что необходимо учитывать при интерпретации экспериментов. Найдено, что поглощение основным триплетным состоянием  $D^-$  отличается от случая синглета дополнительной сильной линией, которая лежит в области энергий, меньших энергии циклотронного резонанса. Получены энергии электрон-донорных комплексов  $D^{2-}$  с тремя электронами на нулевых УЛ в квадруплетном и дублетном состояниях. Показано, что состояния  $D^{2-}$  оказываются неустойчивыми относительно отрыва электрона.

1. Селективное легирование полупроводниковых квантовых ям (КЯ) GaAs/GaAlAs позволяет реализовать ситуацию, когда часть электронов, слабо связанных с донорами в барьерном слое GaAlAs, переходит на нейтральные доноры  $D_0$ , находящиеся в КЯ GaAs. При этом в КЯ образуются устойчивые отрицательно заряженные состояния  $D^-$ , захватившие два электрона [<sup>1, 2</sup>]. Состояния  $D^-$  наиболее отчетливо регистрируются в сильном магнитном поле  $H$  по переходам  $D^- \rightarrow N$ , в которых один электрон при поглощении инфракрасного кванта возбуждается с нулевого на УЛ с номером  $N$ ; наиболее сильным является дипольно-разрешенный переход  $D^- \rightarrow N=1$  с  $\Delta M_z = 1$ . Энергия связи комплекса  $D^-E_B$  определялась в [<sup>1</sup>] как энергия перехода  $D^- \rightarrow N=1$  за вычетом циклотронной энергии  $\hbar\omega_c = \hbar eH/m^*c$ . Определенная таким образом  $E_B$  находится в согласии с энергией связи, определяемой по пикам магнитопроводимости, связанным с переходом на нулевом УЛ  $D^- \rightarrow N=0$ , а также с расчетом квантовым методом Монте-Карло [<sup>3</sup>] энергии связи основного синглетного  $s$ -состояния  $D^-$  лишь с учетом поляронной поправки.

В настоящей работе мы хотим показать, что при определении энергий связи  $E_B$  по энергиям переходов  $D^-$  необходимо учитывать, что в присутствии магнитного поля в КЯ все состояния  $D^-$  дискретны и локализованы и после поглощения инфракрасного кванта система находится в конечном возбужденном распадном состоянии, что требует дополнительной энергии кванта. По-видимому, это может объяснить, по крайней мере частично, обнаруживаемое систематическое занижение теоретических значений энергий связи  $E_B$ , полученных для синглетного основного состояния  $D^-$  [<sup>3</sup>], по сравнению с определенными в экспериментах [<sup>1, 2</sup>].

Отметим также, что, поскольку эффективные  $g$ -факторы электронов малы в GaAs, необходимо учитывать переходы не только из синглетного состояния, но и из расположенных близко по энергии триплетных состояний  $D^-$ , которые, как и в 3D случае (см. [<sup>4, 5</sup>] и цитированную литературу), являются устойчивыми в магнитном поле. Как будет показано, спектры инфракрасного поглощения синглета и триплета отличаются наличием у последнего дополнительной диполь-

но-разрешенной линии, расположенной в области энергий, меньших  $\hbar\omega_c$ . Существование, что при этом переходе конечное состояние  $D^-$  может оказаться долгоживущим.

2. При рассмотрении мы будем пренебрегать перемешиванием различных УЛ, что оправдано для сильных магнитных полей  $\hbar\omega_c \gg E_0$  и является хорошим приближением вплоть до  $\hbar\omega_c \gg E_0$ . Здесь  $E_0 = (\pi/2)^{1/2} (e^2/\epsilon r_H) \sim \sqrt{H}$  — характерная энергия кулоновских взаимодействий в магнитном поле, так что приведенное выше условие сводится к требованию  $r_H \ll a_B^*$ , где  $r_H = (\hbar c/eH)^{1/2}$  — магнитная длина,  $a_B^* = \epsilon \hbar^2/m^* e^2$  — эффективный борковский радиус. Для GaAs  $a_B^* \approx 100 \text{ \AA}$  и равенство  $r_H = a_B^*$  соответствует полю  $H \approx 6.7 \text{ Т}$ .

Кроме того, мы будем рассматривать чисто 2D модель, которая позволяет точно получить энергии различных состояний  $D^-$  и вместе с правилами отбора получить энергии переходов при поглощении инфракрасных квантов. В применении к квазидвумерной КЯ конечной ширины  $d$  чисто 2D рассмотрение физически соответствует ситуации, когда можно ограничиться учетом только самого нижнего уровня размерного квантования. В сильном магнитном поле это оправдано, когда подмешивание высших уровней размерного квантования за счет кулоновских взаимодействий (рассматриваемое во втором порядке теории возмущений) мало:  $E_0^2/(\hbar^2/m^* d^2) \ll E_0$ , что эквивалентно условию  $r_H a_B^* \gg d^2$  (и является хорошим приближением вплоть до  $r_H a_B^* \gg d^2$ ). Обратим внимание на то, что при фиксированном  $d$  это неравенство нарушается с ростом поля  $H$ , что физически отвечает «тримеризации» ситуации (очевидной в пределе  $r_H \ll d$ ).

Ясно, что в применении к КЯ чисто 2D рассмотрение не может претендовать на хорошее количественное описание. Как будет показано, энергии связи  $D^-$  оказываются завышенными, например, для синглетного состояния в КЯ с  $d = 100 \text{ \AA}$  в поле  $H = 20 \text{ Т}$  на 10–15%. Однако 2D рассмотрение позволяет установить важные количественные особенности спектров  $D^-$ , необходимые для правильной интерпретации экспериментов [1, 2].

Следуя [6] (см. также [7]), координатные волновые функции (ВФ) электрон-примесных комплексов строим из ВФ невзаимодействующих частиц на данных УЛ. Удобно при этом пользоваться ВФ, получаемыми в методе факторизации [8–10] с помощью лестничных бозевских операторов

$$a^+ = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left( \frac{z}{2r_H} - 2r_H \frac{\partial}{\partial z^*} \right), \quad b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{z^*}{2r_H} - 2r_H \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (1)$$

$z = x + iy$  — 2D комплексная переменная. ВФ имеют вид

$$\varphi_{nm}(r) = \langle r | nm \rangle = \frac{(a^+)^n (b^+)^m}{(2\pi r_H^2 n! m!)^{1/2}} \exp \left( -\frac{|z|^2}{4r_H^2} \right). \quad (2)$$

В (2)  $n$  — номер УЛ;  $m$  — осцилляторное квантовое число, по которому энергия вырождена;  $n, m$  определяют проекцию момента  $m_z$  соотношением  $m_z = n - m$  и связаны с квадратом радиуса орбиты соотношением  $\langle r^2 \rangle_{nm} = 2(n+m+1)r_H^2$ . В таком представлении ВФ заряженной частицы в магнитном поле эквивалентна двум независимым линейным осцилляторам. Это делает чрезвычайно удобным систематическое вычисление матричных элементов взаимодействия [10] (см. также [11, 12]): в Фурье-представлении они факторизуются по квантовым числам  $n, m$ .

Состояния  $D^-$  удобно характеризовать в сильном магнитном поле набором квантовых чисел  $\{S, S_z, N, M\}$ . Здесь  $S, S_z$  — полный спин электронов и его проекция на ось поля  $H$ ,  $N = n_1 + n_2$  — номер УЛ ( $n_1, n_2$  — не являющиеся по отдельности хорошими квантовыми числами номера УЛ отдельных электронов), а квантовое число  $M = N - M_z$  (где  $M_z$  — точное квантовое число) — значение проекции полного момента.

От координат электронов  $r_1, r_2$  удобно с помощью ортогонального преобразования перейти к координатам  $r = (r_1 - r_2)/\sqrt{2}$ ,  $R = (r_1 + r_2)/\sqrt{2}$ , что сохраняет квадратичную форму  $\sum_i |z_i|^2$  [6] в показателях экспонент ВФ. Точная ВФ

электрон-примесного комплекса с квантовыми числами  $N, M$  и спином  $S$  должна определяться из решения секулярного уравнения, включающего в себя матричные элементы гамильтониана кулоновских  $e-e$  взаимодействий и взаимодействий электронов с заряженной примесью

$$\hat{H} = -\frac{e^2}{\epsilon r_1} - \frac{e^2}{\epsilon r_2} + \frac{e^2}{\epsilon |r_1 - r_2|} \quad (3)$$

между полным набором ортонормированных ВФ

$$\varphi_{n, m}(r) \varphi_{N-n, M-m}(R). \quad (4)$$

Набор (4) содержит конечное число состояний (в отличие от экситонных комплексов, рассмотренных в [11, 12]), причем они локализованы в различных частях  $r$ -пространства. Четность различных квантовых чисел  $n, m$  ( $n, m$  — целые неотрицательные) определяется полным спином  $S$  — четностью при перестановке  $r_1 \rightleftharpoons r_2$ . Поскольку четность  $\varphi_{n, m}(r)$  есть  $(-1)^{n+m} = (-1)^M z$ , то для синглета  $S = 0$  (триплета  $S = 1$ )  $n + m$  должно быть четным (нечетным). Прямой подсчет показывает, что как для  $S = 0$ , так и для  $S = 1$  число различных состояний  $\mathcal{N}$  в (4) (т. е. кратность вырождения уровня с данными  $N, M$  и  $S$ ) равно  $\mathcal{N} = (N+1)(M+1)/2$ . Исключением является случай, когда оба числа  $N$  и  $M$  четны. Тогда  $\mathcal{N} = (NM + N + M)/2 + 1$  для  $S = 0$  и  $\mathcal{N} = (NM + N + M)/2$  для  $S = 1$ .

3. В дальнейшем в конкретных расчетах мы ограничимся рассмотрением случаев, когда (1) оба электрона находятся на нулевых УЛ  $N = 0$  и (2) один электрон возбужден на первый УЛ  $N = 1$ . В этих случаях полный базис составляют ВФ соответственно

$$\varphi_{0, m}(r) \varphi_{0, M-m}(R), \quad (5)$$

$$\varphi_{0, m}(r) \varphi_{1, M-m}(R), \varphi_{1, l}(r) \varphi_{0, M-l}(R) \quad (6)$$

с различными квантовыми числами  $m$  в (5) и  $m$  и  $l$  в (6).

После перехода в гамильтониане (3) к переменным  $r, R$ , матричные элементы парных  $e-e$  взаимодействий оказываются диагональными в выбранном представлении и выражаются через матричные элементы электрон-примесного взаимодействия на нулевом и первом уровнях УЛ

$$V_{0, m} = \frac{(2m-1)!!}{2^m m!} E_0, \quad V_{1, m} = \frac{4m-1}{4m-2} V_{0, m}. \quad (7)$$

Наоборот, матричные элементы электрон-примесных взаимодействий оказываются недиагональными и выражаются через матричные элементы парных взаимодействий частиц на нулевых УЛ  $U_{mn}^{(00)}(s)$  и прямых и обменных взаимодействий на нулевом и первом УЛ  $U_{mn}^{(01)}(s)$ ,  $U_{mn}^{(01)E}(s)$ . Их явный вид, удобный для непосредственных расчетов, приведен в Приложении. Приведем здесь необходимые матричные элементы гамильтониана (3)

$$\langle n, M - m'; 0, m' | \hat{H} | 0, m; n, M - m \rangle = \delta_{m, m'} \frac{1}{\sqrt{2}} V_{0, m} - 2\sqrt{2} U_{\min(m, m')}^{(0n)} \min(M - m, M - m') (|m - m'|) \quad (8)$$

(где  $n = 0, 1$ );  $\langle n, M - m'; 1, m' | \hat{H} | 1, m; n, M - m \rangle$  дается выражением (8) с  $n = 1$ , в котором произведена замена  $V_{0, m} \rightarrow V_{1, m}$ , и

$$\begin{aligned} \langle 0, M - l; 1, l | \hat{H} | 0, m; 1, M - m \rangle = \\ = -2\sqrt{2} U_{\min(m, l)}^{(01)E} \min(M - m, M - l) (|m - l|). \end{aligned} \quad (9)$$

Выше введено обозначение

$$\varphi_{n_1, m_1}(\mathbf{r}) \varphi_{n_2, m_2}(\mathbf{R}) \equiv |n_1, m_1; n_2, m_2\rangle.$$

4. Результаты расчетов энергий взаимодействий состояний  $D^-$  с  $M \leq 20$  и различными  $N$ ,  $S = 0, 1$  представлены на рис. 1,  $a-g$  (энергии триплетных состояний  $N = 0$  с  $M = 1, 2$  ранее были получены в [6], где они даны в единицах  $e^2/\epsilon r_H$ ; см. также [16]).

Остановимся сначала на общих особенностях спектров. Из рис. 1,  $a-g$  видно, что с ростом  $M$  в спектрах постепенно выделяется все большее число отдельных «ветвей». Самые низколежащие — «горизонтальные» — физически отвечают одному электрону, связанному на доноре с квантовыми числами  $m = 0, 1, 2, \dots$ , в то время как второй электрон уходит на максимально возможное при данном  $M$  расстояние и все более слабо взаимодействует с нейтральным донором  $D^0$ . Асимптотические значения энергий этих ветвей при  $M \gg 1$  определяются расположенными в порядке возрастания величинами  $-V_{0, m}$  для  $N = 0$  и  $-V_{0, m} - V_{1, l}$  для  $N = 1$ . Укажем здесь несколько первых значений (в единицах  $E_0$ ):  $-V_{0, 0} = -1$ ,  $-V_{1, 1} = -0.75$ ,  $-V_{0, 1} = -V_{1, 0} = -0.5$  (и для  $N = 1$  имеются две практически вырожденные ветви; рис. 1,  $b, z$ ),  $-V_{1, 2} = -0.4375$ ,  $-V_{0, 2} = -0.375$ . Подчеркнем, что для самых низколежащих ветвей эти асимптотические значения практически достигаются уже при  $M \leq 3-4$ .<sup>1</sup>

Обратимся теперь к наиболее высоколежащим ветвям спектра. Они возникают с ростом  $M$  при увеличении момента движения центра масс электронов при сохранении неизменными (и небольшими) квантовых чисел относительного движения: происходит все большее удаление от заряженного центра близко расположенных друг к другу электронов. Энергия таких состояний возрастает при этом примерно как  $\mathcal{E}(S) - \text{const} \cdot M^{-1/2}$ , где  $\mathcal{E}(S)$  — верхняя граница спектра двух взаимодействующих электронов со спином  $S$  (ее положение не зависит от

<sup>1</sup> Отметим, что аналогичные по своей природе состояния появляются с ростом  $M$  и для  $2D$  магнитоэкситонных примесных комплексов ( $D^+, X$ ), когда от  $D^0$  уходит дырка [11, 12]. Отличие от настоящего случая состоит в том, что там они попадают в непрерывный спектр — экситонную зону (с делокализованными ВФ) и являются квазидискретными уровнями с конечной шириной линии.

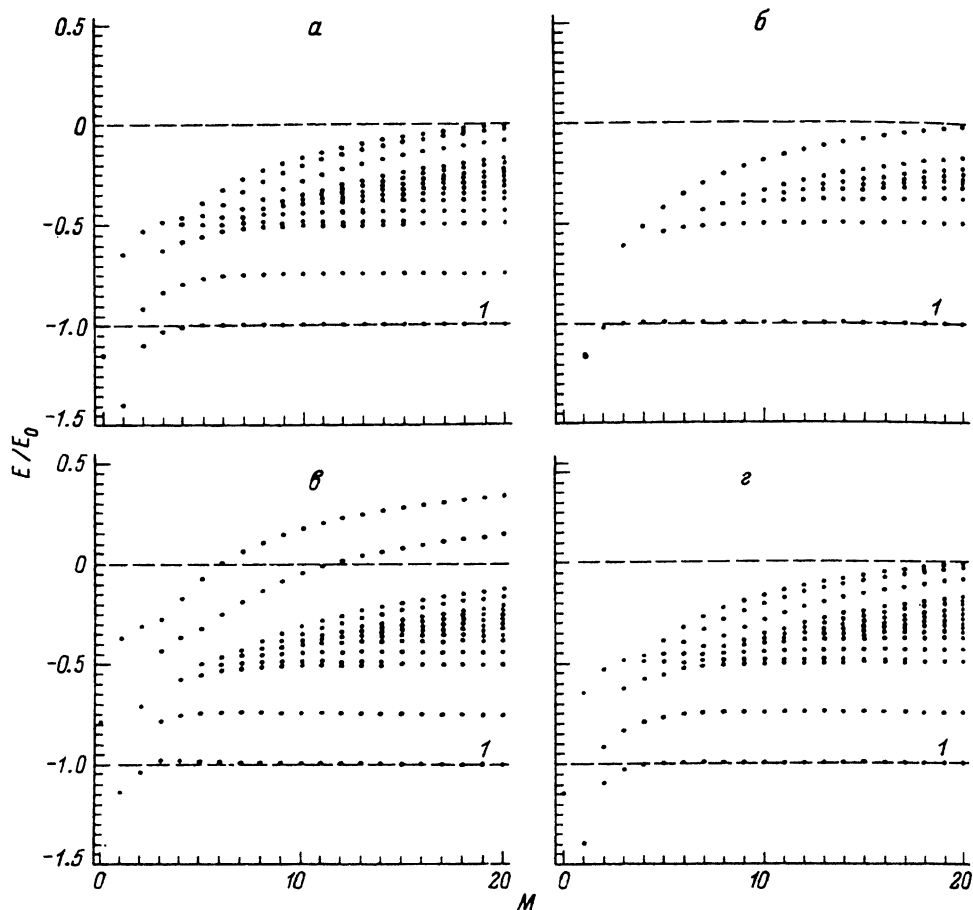


Рис. 1. Энергии взаимодействий (в единицах  $E_0 = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \frac{e^2}{er_H} D^-$  с квантовыми числами  $M = N - M_x \leq 20$  синглетных состояний  $S=0$  на нулевом УЛ  $N=0$  (а), триплетных состояний  $S=1$  на нулевом УЛ  $N=0$  (состояние с  $M=0$  в силу принципа Паули отсутствует) (б), синглетных состояний  $S=0$  на первом УЛ  $N=1$  (в), триплетных состояний  $S=1$  на первом УЛ  $N=1$  (г). Состояния  $D^-$ , лежащие ниже основного состояния  $D^0$  с энергией  $E_0$  (линия 1), при  $N=0$  являются устойчивыми относительно отрыва электрона, при  $N=1$  могут оказаться долгоживущими.

наличия примеси). Используя (8), можно показать, что как для  $N=0$ , так и для  $N=1$   $\mathcal{E}(0) = 0.7071E_0$ ,  $\mathcal{E}(1) = 0.3536E_0$ . Отметим, что для синглетных состояний, в которых принципом Паули допустимо нахождение электронов на совпадающих орбитах, состояния с положительной энергией достигаются уже при небольших  $M$ . Обратим внимание на то, что для  $N=1$ ; когда принцип Паули можно удовлетворить за счет дополнительного квантового числа, в спектре быстро проявляются две высоколежащие ветви (рис. 1, в).

Между двумя предельными случаями низколежащих и возбужденных состояний имеются и промежуточные случаи, отвечающие все менее плотному в  $g$ -пространстве расположению электронов, когда имеется спектр, близкий к непрерывному.

5. Рассмотрим устойчивость комплексов  $D^-$  по отношению к отрыву одного электрона. На уровне  $n=0$  электрон с заряженным донором наиболее сильно

связывается в состоянии с  $m = 0$ , энергия связи  $D^0$  равна при этом  $^{[12]} V_{0,0} = E_0$  (см. также  $^{[10]}$ ), где для  $2D$  ситуации рассмотрены произвольные поля  $H$ ). Таким образом, устойчивыми будут состояния  $D^-$  с  $N = 0$ , полная энергия взаимодействий которых оказывается меньше  $-E_0$ . Остальные состояния термодинамически неустойчивы относительно ухода электрона на бесконечность (например, за счет каскадного испускания акустических фононов).

Для комплексов на нулевых УЛ имеется всего одно устойчивое синглетное состояние с  $M = 0$  и энергией связи  $E_B = 0.2929E_0$  (что для поля  $H = 10$  Т и  $\epsilon = 12.5$  составляет  $5$  мэВ  $\approx 42$  см $^{-1}$ )<sup>2</sup> и три устойчивых триплетных состояния, из которых только одно (с  $M = 1$ ) сильно связано с  $E_B = 0.1465E_0$ . Наименьшей полной энергией без учета энергии спинов в магнитном поле  $g\mu_B H S_z$  обладает, как и должно быть, синглетное состояние с  $M = 0$ , не имеющее узлов. Разность энергий взаимодействия основных уровней синглетных и триплетных состояний  $\Delta E_{ST} = 0.1465E_0$ . В достаточно сильных полях  $|g|\mu_B H > \Delta E_{ST} \propto \sqrt{H}$  и основным состоянием является поляризованный по полю (при  $g < 0$ ) триплет с  $S_z = 1$ . Интересно, что наибольшая энергия связи  $2D$  магнитоэкситона, связанного на заряженной примеси ( $D^+$ ,  $X$ ) на нулевых УЛ (достигаемая при  $M = 1$ ), составляет  $0.1189E_0$   $^{[11, 12]}$  и оказывается меньше энергий связи  $D^-$  как с  $S = 0$ , так и с  $S = 1$ .

Для случая, когда один электрон возбужден на первый УЛ, ситуация оказывается несколько иной. Строго говоря, стабильных состояний  $D^-$  с  $N = 1$  нет. Однако если по энергии  $D^-$  с  $N = 1$  отстоит вниз от первого УЛ более чем на  $-E_0$ , уход одного электрона на бесконечность обязательно связан с его релаксацией на нулевой УЛ. Вероятность такого перехода за счет электрон-фононных взаимодействий в сильном поле  $H$  может оказаться значительно меньше, чем при релаксации на данном УЛ с изменением квантового числа  $M$  (из-за разницы в масштабах энергий  $\hbar\omega_c \gg E_0$ ). При этом такие низколежащие состояния  $D^-$  с  $N = 1$  могут обладать сравнительно большими временами жизни.

Для синглета  $S = 0$ ,  $N = 1$  имеются два таких состояния (сильно связано только одно — с  $M = 1$  и  $E_B = 0.1416E_0$ ) — рис. 1, в. Для триплетта  $S = 1$  имеется пять таких состояний, причем сильно связаны из них два: с  $M = 0$  и  $E_B = 0.1465E_0$  (что в точности совпадает с энергией связи состояния  $S = 1$ ,  $M = 1$  на нулевых УЛ, как и должно быть, поскольку ВФ связаны операцией обращения времени), и состояние с  $M = 1$  и большой энергией связи  $E_B = 0.3965E_0$  — рис. 1, г.

6. Получим по найденным энергиям взаимодействий энергии переходов  $D^- \rightarrow N$  с поглощением фотона, возбуждающего один электрон с нулевого на УЛ с номером  $N$ . Как для триплетта  $S = 1$ , так и для синглета  $S = 0$  можно учитывать переходы только из наиболее сильно связанных состояний на нулевых УЛ с  $M = 1$  и  $M = 0$  соответственно. Остальные в принципе стабильные триплетные состояния  $D^-$  обладают малыми энергиями связи и уже при гелиевых температурах могут не учитываться (например, для состояния  $S = 1$ ,  $M = 2$  на нулевых УЛ  $E_B = 0.0215E_0 \approx 4$  К при  $H = 10$  Т).

В геометрии Фарадея дипольно-разрешенными являются переходы  $\Delta M_z = \pm 1$  с сохранением спина  $S$ ,  $S_z$ . В приближении сильного поля, когда подмешивание высших УЛ не учитывается, из основных состояний  $D^-$  с  $N = 0$  дипольно разрешены только переходы с  $\Delta N = 1$  и сохранением осцилляторного квантового числа  $M$ . При учете подмешивания высших УЛ дипольно разрешены переходы с изменением  $M$ , которые соответствуют произвольным  $\Delta N$ , однако

<sup>2</sup> Сравним этот результат с расчетом  $^{[3]}$  для режима сильного магнитного поля, когда  $\hbar\omega_c/2 R_y^* \approx 3$  ( $H = 20.2$  Т,  $R_y^* = 5.8$  мэВ — эффективный ридберг для GaAs). Расчет  $^{[3]}$  для КЯ толщиной  $100$  Å дает для синглетного  $s$ -состояния  $D^-$  энергию связи: 1)  $1.13 R_y^*$  без учета различия эффективных масс  $m$  и диэлектрических проницаемостей  $\epsilon$  GaAs и GaAlAs, 2)  $1.11 R_y^*$  с учетом различия и 3)  $1.22 R_y^*$  с учетом различия  $m$ ,  $\epsilon$ , а также с учетом непараболичности зоны проводимости. Наш результат для чисто  $2D$  случая  $0.2929E_0 = 1.27 R_y^*$ , как это и следует ожидать, оказывается большим.

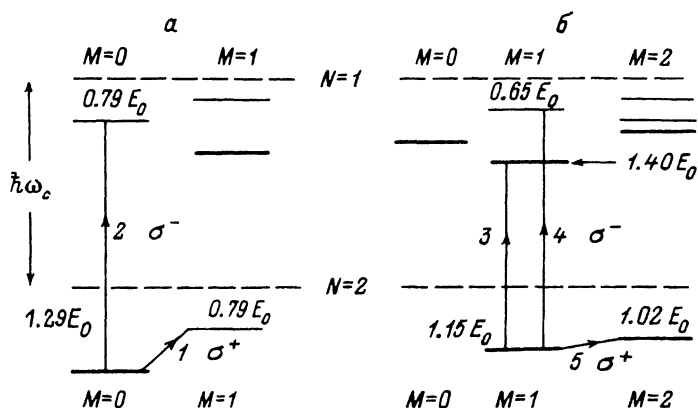


Рис. 2. Дипольно-разрешенные переходы из основного синглетного состояния  $D^-$  с  $S=0, M=0$  (а), основного триплетного состояния  $D^-$  с  $S=1, M=1$  (б).

Штрихом показаны энергии не взаимодействующих УЛ (без учета спиновых энергий  $\mu_B H S_z$ ), тонкими линиями — распадное состояние  $D^-$ , жирными линиями для  $N=0$  — устойчивые состояния, для  $N=1$  — состояния, которые могут оказаться долгоживущими. Энергии переходов  $\hbar\omega_1 = 0.5E_0$ ,  $\hbar\omega_2 = \hbar\omega_4 = \hbar\omega_c + 0.5E_0$ ,  $\hbar\omega_3 = \hbar\omega_c - 0.25E_0$ ,  $\hbar\omega_5 = 0.13E_0$ . Переходы 1, 5 с  $\Delta M = 0$  отвечают правой поляризации излучения  $\sigma^+$  и являются слабыми по параметру  $(E_0/\hbar\omega_c)^2$ . «Вертикальные» переходы с  $\Delta M = 0$  являются сильными и отвечают левой поляризации  $\sigma^-$ .

они слабы по параметру  $(E_0/\hbar\omega_c)^2$  (и обладают дополнительной малостью, зависящей от  $\Delta M, \Delta N$ ). К такому роду переходов относятся переходы  $D^- \rightarrow N=0$ , возникающие при правой поляризации излучения  $\sigma^+$ : для синглета — переход 2 на рис. 2 ( $M=0 \rightarrow M=1$ ) с энергией  $0.5E_0$ , для триплета — переход 5 на рис. 2 ( $M=1 \rightarrow M=2$ ) с энергией  $0.13E_0$  (без учета поправок  $\sim E_0^2/\hbar\omega_c$ ). Подчеркнем, что лишь для триплета энергия перехода оказывается близкой к его энергии связи  $E_B$  (и на 15% ее меньше); для синглета энергия перехода в конечное распадное состояние превосходит энергию связи на 71%.

Рассмотрим теперь сильные «вертикальные» переходы с  $\Delta M=0$  и  $\Delta N=1$ , отвечающие левой поляризации  $\sigma^-$  (рис. 2). Для синглета  $S=0, N=1$  имеется единственное конечное состояние с  $M=0$ , причем оно является распадным — величина энергии взаимодействий  $-0.7929E_0 > -E_0$ . Переход в это состояние требует энергии кванта  $\hbar\omega = \hbar\omega_c + 0.5E_0$ , и с учетом последующего распада конечного состояния при взаимодействии с фононами сам процесс может быть назван фототермической ионизацией (см., например, [5] и цитируемую там литературу), а не является просто фотоионизационным переходом в непрерывный спектр (ср. [1–3]).

В случае триплета  $S=1$  при  $N=1$  имеются два конечных состояния с  $M=1$ . Поскольку два исходных базисных состояния из (6) точно вырождены (они связаны операцией обращения времени  $t \rightarrow -t$ ; см. левую часть (10), определение ВФ (2), а также соотношение  $(b^+)^* = ia^+$ , следующее из (1)), правильные комбинации даются выражением

$$\frac{\varphi_{0,1}(\mathbf{r})\varphi_{1,0}(\mathbf{R}) \pm \varphi_{1,0}(\mathbf{r})\varphi_{0,1}(\mathbf{R})}{\sqrt{2}} = \begin{cases} |z_1|^2 - |z_2|^2, & (10a) \\ z_1^* z_2 - z_1 z_2^*. & (10b) \end{cases}$$

В правой части (10) опущены нормировочные множители, а также экспоненциальные части ВФ. Переходы в оба состояния (10) из состояния  $S=1, N=0, M=1$  с ВФ  $\varphi_{0,1}(\mathbf{r})\varphi_{0,0}(\mathbf{R})$  являются дипольно-разрешенными и обладают

одинаковыми значениями матричного элемента перехода: дипольно-активным является переход  $\varphi_{0,1}(r)\varphi_{0,0}(R) \rightarrow \varphi_{0,1}(r)\varphi_{1,0}(R)$  с сохранением квантовых чисел относительного движения и с  $\Delta l = 1, \Delta m = 0$  для ВФ центра масс.

При переходе в состояние (10а) с большой энергией связи  $E_B = 0.3965E_0$  энергия кванта оказывается равной  $\hbar\omega_c - 0.25E_0$ , т. е. лежит в области энергий, меньших  $\hbar\omega_c$ . Подчеркнем, что состояние (10а) является сильно связанным и его распад связан с релаксацией электрона на нулевой УЛ, т. е. это состояние может оказаться долгоживущим (см. выше обсуждение в п. 5). Насколько нам известно, соответствующий переход экспериментально до сих пор наблюден не был. Возможно, это связано с эффектами насыщения перехода и для его наблюдения требуются, например, эксперименты с временным разрешением или меньшими интенсивностями инфракрасного излучения.

Рассмотрим теперь переход в состояние (10б), которое является распадным (энергия  $-0.6465E_0$ ). Переход в него требует энергии кванта  $\hbar\omega_c + 0.5E_0$ , что совпадает с рассмотренным выше случаем  $S = 0$  (это «случайное» вырождение снимется при учете перемешивания УЛ). Таким образом, данная линия поглощения на  $0.5E_0$  смещена в сторону больших энергий по сравнению с  $\hbar\omega_c$ .

7. Интересно рассмотреть возможность захвата в сильном магнитном поле трех электронов на донорный центр с образованием устойчивых состояний  $D^2$ . Следуя [6], получим энергии электрон-примесных комплексов с тремя электронами на нулевых УЛ. С помощью ортогональных преобразований удобно перейти к координатам, выделяющим движение центра масс [6]

$$Z = \frac{z_1 + z_2 + z_3}{\sqrt{3}}, \quad z_a = \frac{z_1 + z_2 - 2z_3}{\sqrt{6}}, \quad z_b = \frac{z_1 - z_2}{\sqrt{2}}. \quad (11)$$

Для трех электронов в квартетном состоянии  $S = 3/2$ : в частности, на самом нижнем спин-поляризованном нулевом УЛ, ВФ относительного движения, полностью антисимметричные однородные полиномы по степеням  $z_a^*, z_b^*$  [6]. Здесь мы воспользуемся представлением [7] полной системы ортонормированных полиномов, которые для удобства запишем в виде (здесь  $a_l = (2\pi r_H^2 l!)^{1/2} r_H^l$ )

$$|k, n\rangle_{\frac{3}{2}, S_z} = \sqrt{2} a_k^{-1} + n a_n^{-1} \frac{\tilde{z}_1^k - \tilde{z}_2^k}{2i} (\tilde{z}_1 \tilde{z}_2)^n \cdot S_{\frac{3}{2}, S_z} \quad (12)$$

$$\tilde{z}_1(2) = \frac{z_a^* \pm iz_b^*}{\sqrt{2}}, \quad k = 3m, \quad m = 1, 2, \dots, \quad n = 0, 1, \dots \quad (13)$$

В (12)  $S_{3/2, S_z}$  — спиновая часть ВФ (например,  $S_{3/2, -3/2}(\sigma_j) = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ ).

Для дублетных состояний с  $S = 1/2$  ВФ обладает смешанной симметрией (см., например, [14, 15]). В качестве базисных спиновых функций двумерного представления выбираем (например, для  $S_z = -1/2$ )

$$S_{1/2, -1/2}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - 2|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \}, \quad (14)$$

$$S_{1/2, -1/2}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \}, \quad (15)$$



преобразующиеся при перестановке спинов по представлению

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad P_{23} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (16)$$

(и  $P_{13} = P_{12}P_{23}P_{12}$ ). Антисимметричная ВФ относительного движения имеет вид

$$|k, n\rangle_{1/2, S_z} = F_{k, n}^{(1)}(z_a^*, z_b^*) \cdot S_{1/2, S_z}^{(1)} + F_{k, n}^{(2)}(z_a^*, z_b^*) \cdot S_{1/2, S_z}^{(2)}, \quad (17)$$

где  $F_{k, n}^{(1, 2)}$  — пара однородных полиномов степени  $k + 2n$ , преобразующихся по представлению  $-P_{ij}$ , сопряженному (16). Полная ортонормированная система таких полиномов имеет вид (ср. (12))

$$F_{k, n}^{1, 2} = a_k^{-1} n a_n^{-1} \left( \frac{\tilde{z}_1^k - \tilde{z}_2^k}{2i}, \pm \frac{\tilde{z}_1^k + \tilde{z}_2^k}{2} \right) \cdot (\tilde{z}_1 \tilde{z}_2)^n, \quad (18)$$

где  $k = 3m + 1$  ( $k = 3m + 2$ ) для верхнего (нижнего) знака в (18), и квантовые числа  $m, n$  принимают значения  $m, n = 0, 1, \dots$ . Это нетрудно проверить, учитывая, что

$$P_{12} \tilde{z}_1(2) = \tilde{z}_2(1), \quad P_{23} \tilde{z}_1(2) = \exp(\pm i2\pi/3) \tilde{z}_2(1).$$

В другом виде ВФ для  $S = 1/2$  рассматривались в [16].

С учетом движения центра масс полный ортонормированный базис ВФ с квантовым числом  $M = i + k + 2n$  и полным спином  $S$  имеет вид

$$|i, k, n\rangle_{S, S_z} = a_i^{-1} (Z^*)^i |k, n\rangle_{S, S_z} \equiv |N\rangle. \quad (19)$$

Для вычисления взаимодействия электронов с центром  $\langle N' | V_e | N \rangle$  переходим с помощью ортогонального преобразования от (11) к переменным, выделяющим координату одного электрона

$$Z' = \frac{z_1 + z_2}{\sqrt{2}}, \quad z_b = \frac{z_1 - z_2}{\sqrt{2}}, \quad z_3, \quad (20)$$

в которых  $|N\rangle$  (19) представляется в виде суперпозиции ВФ трех свободных частиц в магнитном поле. Поэтому матричные элементы взаимодействия с примесным центром  $\langle N' | V_e | N \rangle = -3 \langle N' | \frac{e^2}{\varepsilon |z_3|} | N \rangle$  сводятся к сумме (явных громоздких выражений не выписываем) матричных элементов взаимодействия с центром  $V_{0, m}^{-3}$ . Матричные элементы  $e-e$  взаимодействий также сводятся к сумме  $V_{0, m}$  (см. [7]).

На рис. 3 представлены результаты расчетов энергий состояний с  $M \leq 15$  для дублета  $S = 1/2$  (а), квадруплета  $S = 3/2$  (б) (энергия состояния с  $M = 3$ ,

<sup>3</sup> Вычисляя матричные элементы от части гамильтониана  $\hat{H}$ , инвариантной относительно перестановок частиц, для  $S = 1/2$  необходимо учитывать обе «вырожденные» координатные ВФ (18) одной симметрии.

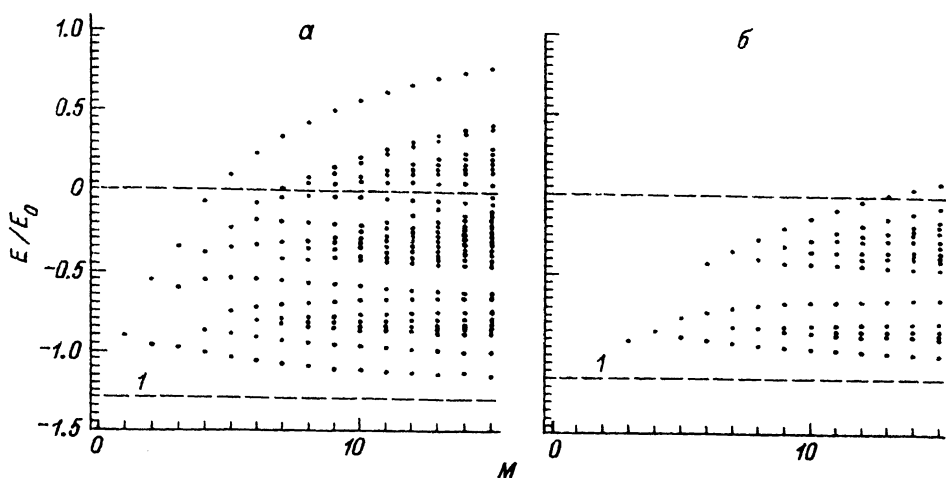


Рис. 3. Энергии взаимодействий состояний  $D^{2-}$  с тремя электронами на нулевом УЛ с квантовыми числами  $M \leq 15$  а) дублетных состояний  $S=1/2$ ,  $N=0$  (состояние с  $M=0$  в силу принципа Паули отсутствует), б) квадруплетных состояний  $S=3/2$ ,  $N=0$  (состояния с  $M < 3$  отсутствуют).

Состояний, устойчивых относительно отрыва электрона, нет: границей устойчивости для  $D^{2-}$  с  $S=1/2$  является энергия основного синглетного состояния  $D^- - 1.29E_0$  (показана на рис. 2, а штриховой линией 1), для  $D^{2-}$  с  $S=3/2$  — энергия основного триплетного состояния  $D^- - 1.15E_0$  (штриховая линия 1 на рис. 3, б).

ранее рассчитанная в [6], дана там с ошибкой). Отметим, что  $\mathcal{N}$  (кратность вырождения уровня с данным  $M$ ) для  $S=1/2$  оказывается значительно выше, чем для  $S=3/2$ . Так, например, при  $M=15$   $\mathcal{N}=45$  для  $S=1/2$  и  $\mathcal{N}=19$  для  $S=3/2$ .

Наиболее высоколежащие ветви спектра при  $M \gg 1$  соответствуют удалению от заряженной примеси центра масс трех электронов при сохранении их наиболее плотного взаимного расположения, совместимого с  $S$ . Верхние границы спектра асимптотические, достигаемые при  $M \gg 1$ , составляют  $1.5910E_0$  для  $S=1/2$  и  $0.9612E_0$  для  $S=3/2$  (см. также [6, 7, 16]). Наоборот, низколежащие (и спадающие) ветви спектра при  $M \gg 1$  физически отвечают уходу одного электрона, в то время как два других остаются связанными в  $D^-$  (ср. обсуждение вида спектра  $D^-$  в п. 4).

Для устойчивости  $D^{2-}$  со спином  $S=3/2$  ( $S=1/2$ ) относительно отрыва электрона необходимо, чтобы по энергии  $D^{2-}$  был расположен ниже, чем самое низколежащее состояние  $D^-$  на нулевых УЛ с  $S=1$  ( $S=0$  или  $S=1$ ). Границами стабильности, таким образом, являются энергии  $-1.1465E_0$  для  $S=3/2$  и  $-1.2929E_0$  для  $S=1/2$ , которые при конечных  $M$  не достигаются (рис. 3). Следовательно, термодинамически устойчивых  $2D$  состояний  $D^{2-}$  нет. Отметим, однако, что распад  $D^{2-}$  в отсутствие внешних взаимодействий (например, с фононами) запрещен. Таким образом, при низких температурах состояния  $D^{2-}$  могут в принципе оказаться долгоживущими, а возможность их наблюдения в неравновесных условиях (например, при фотовозбуждении) зависит от их времен жизни, которые определяются, по-видимому, взаимодействиями с акустическими фононами (и зависят от величины поля  $H$ ). Исследование кинетики распада таких состояний в сильном магнитном поле (как и нестабильных возбужденных состояний  $D^-$  — см. п. 5) требует, конечно, отдельного рассмотрения.

В заключение автор выражает благодарность А. Ю. Сиваченко, С. Г. Тиходесеву и В. И. Юдсону за полезное обсуждение результатов, а также В. Н. Коробейникову за участие в численных расчетах на начальном этапе этой работы.

Для матричных элементов обменного  $e-e$  взаимодействия на нулевом и первом УЛ  $U_{mn}^{(01)E}$  имеем (см. также [10-12])

$$U_{mn}^{(01)E}(s) = \left( \frac{m!n!}{(m+s)!(n+s)!} \right)^{1/2} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \tilde{U}(q) e^{-2x} x^{s+1} L_m^s(x) L_n^s(x), \quad (\text{П.1})$$

где  $L_n^s(x)$  — обобщенные полиномы Лагерра,  $x \equiv q^2 r_H^2 / 2$ ,  $\tilde{V}(q) = 2\pi e^2 / \epsilon q$  — Фурье-образ кулоновского потенциала взаимодействия. Матричные элементы взаимодействия на нулевых УЛ  $U_{mn}^{(00)}$  отличаются от (П.1) заменой  $x^{s+1} \rightarrow x^s$ , прямых взаимодействий на нулевом и первом УЛ  $U_{mn}^{(01)}$  — заменой  $x^{s+1} \rightarrow x^s L_1(x)$ . С использованием производящей функции <sup>4</sup> для  $L_n^s(x)$  матричные элементы выражаются в виде алгебраических сумм порядка  $(n+1)(m+1)$

$$U_{mn}^{(00)}(s) = E_0 (m!(m+s)!n!(n+s)!)^{-1/2} 2^{-(2s+m+n)} - \frac{1}{2} \times \\ \times \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^n c_m^k c_n^l 2^{-k-l} [2(k+l+s)-1]!! [2(m-k)-1]!! [2(n-l)-1]!! \quad (\text{П.2})$$

и для матричных элементов обменного взаимодействия

$$U_{mn}^{(01)E}(s) = E_0 (m!(m+s)!n!(n+s)!)^{-1/2} 2^{-2(s+m+n)} - \frac{5}{2} \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^n c_m^k c_n^l \times \\ \times 2^{k+l} [2(s+m+n-k-l)+1]!! G_k G_l, \\ G_k = \begin{cases} 1, & k=0 \\ -[2k-3]!!, & k=1, 2, \dots, \end{cases} \quad (\text{П.3})$$

где  $C_n^l$  — биномиальные коэффициенты. Матричный элемент  $U_{nm}^{(01)}(s)$  рассчитываем как разность (П.2) и (П.3), поскольку  $L_1(x) = 1-x$ . При фиксированных  $m, n$  матричные элементы с ростом  $s$  убывают экспоненциально.

Добавление, сделанное 2 июня 1992 г. После того как данная работа была послана в печать, автору стало известно, что часть полученных здесь результатов (см. также краткое сообщение [17]) для  $2D$  состояний  $D^-$  на нулевом УЛ содержится также в опубликованной недавно работе [18]. Кроме того, в [19] сообщается о надежной экспериментальной идентификации переходов синглетных состояний  $D^-$  в КЯ в квантующих магнитных полях и полученном согласии с проведенными там вариационными расчетами (см. также [20]). Автор

<sup>4</sup> Преимущество использования производящей функции, а не явного вида  $L_n^s(x)$ , содержащего знакопеременные члены, состоит в том, что в сумме (П.2) все члены (в (П.3) при  $n, m \gg 1$  — большинство) — одного знака, что предпочтительнее для численных расчетов при больших  $n, m$ . Автор благодарен Ю. И. Георгиевскому, указавшему ему на эту особенность представления (П.2) для  $L_m^s(x)$ .

признателен Д. М. Ларсену за информацию о его работах [18, 19] и предоставление их копий, а также за сообщение результатов [20] до их опубликования.

К настоящему времени, дополнив представленную здесь чисто 2D модель учетом 1) поперечного к КЯ движения квазидвумерных электронов, 2) непараболичности зоны проводимости GaAs и 3) резонансных поляронных поправок, мы получили [21, 22] очень хорошее согласие с экспериментами [1, 2] для синглетных состояний  $D^-$  и, кроме того, нашли энергии связи и спектры переходов триплетных состояний  $D^-$ , поддающиеся непосредственной экспериментальной проверке.

#### Список литературы

- [1] Huan S., Najda S. P., Etienne B. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. N 12. P. 1486—1489.
- [2] Huan S., Mandray A., Martinez G., Grynberg M., Etienne B. // 9th Int. Conf. on Electronic Properties of 2D Systems, EP2DS-9, Nara, Japan, 1991; EP2DS-9 Workbook. P. 185; EP2DS-9 Proceedings, Surface Sci. 1992. V. 263. Nos. 1—3.
- [3] Pang T., Louie S. G. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. N 13. P. 1635—1638.
- [4] Larsen D. M. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 42. N 11. P. 742—745; Phys. Rev. B 1979. V. 20. N 12. P. 5217—5227.
- [5] Najda S. P., Armistead C. J. et al. // Semicond. Sci. Technol. 1989. V. 4. N 6. P. 439—454.
- [6] Бычков Ю. А., Иорданский С. В., Элиашберг Г. М. // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 33. № 3. С. 152—155.
- [7] Laughlin R. B. // Phys. Rev. B 1983. V. 27. N 6. P. 3383—3386.
- [8] Johnson M. H., Lippmann B. A. // Phys. Rev. 1949. V. 76. № 6. P. 828—832; 1950. V. 77. N 5. P. 702—705.
- [9] Малкин И. А., Манько В. И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М.: Наука, 1979. Гл. I. § 7.
- [10] McDonald A. H., Ritchie D. S. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. N 12. P. 8336—8344.
- [11] Дзыубенко А. Б. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 84—91.
- [12] Dzyubenko A. B. // Solid State Commun. 1990. V. 74. N 5. P. 409—412; (C) V. 75. N 6.
- [13] Лернер И. В., Лозовик Ю. Е. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. № 3. С. 1167—1175.
- [14] Каплан И. Г. Симметрия многоэлектронных систем. М.: Наука, 1969. Гл. 2.
- [15] Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. М.: Мир, 1983. Т. 2. Гл. 17.
- [16] Бычков Ю. А., Рашба Э. И. // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. № 2 (8). С. 757-766.
- [17] Dzyubenko A. B. // Phys. Lett. A. 1992. V. 165. N 4.
- [18] Larsen D. M., McCann S. Y. // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 3485—3488.
- [19] Mueller E. R., Larsen D. M., Waldman J., Goodhue W. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 2204—2207.
- [20] Larsen D. M., McCann S. Y. // Submitted to Phys. Rev. B.
- [21] Dzyubenko A. B., Sivachenko A. Yu. // Accepted for presentation at Int. Conf. on the Application of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (HMSP'92). Chiba, Japan, Aug. 3—7 1992.
- [22] Dzyubenko A. B., Sivachenko A. Yu. // Accepted for presentation at 5th Int. Conf. on Shallow Impurities in Semiconductors (ICSI-S-V). Kobe, Japan, Aug. 5—8 1992.

Научно-исследовательский центр  
по технологическим лазерам РАН  
Москва

Поступило в Редакцию  
10 марта 1992 г.  
В окончательной редакции  
10 июня 1992 г.