

УДК 621.315.592

## ХИМИЧЕСКИЙ СДВИГ МЕЛКИХ ПРИМЕСНЫХ УРОВНЕЙ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*Н. Н. Аблязов, М. Ю. Кучиев*

Вычислена энергия основного состояния мелкого донора в полупроводнике с параболической зоной проводимости в магнитном поле для разных значений химического сдвига в адиабатическом приближении. Энергия уровня немонотонно зависит от поля для отрицательных значений химсдвига.

1. Мелкие заряженные примеси в полупроводниках, как правило, описываются в приближении эффективной массы [1]. Потенциал примеси считается кулоновским

$$V(r) = -Ze^2/\kappa r, \quad (1)$$

что в случае невырожденной параболической зоны проводимости приводит к боровской серии для уровней энергии донора

$$\left. \begin{aligned} E_n &= E_B/(1+n)^2, \\ E_B &= \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2\kappa^2}, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

где  $Z$  — его заряд,  $\kappa$  — диэлектрическая проницаемость,  $m$  — эффективная масса зоны,  $E_n$  — энергия  $n$ -го уровня. Метод эффективной массы справедлив, если боровский радиус электрона  $a_B = \hbar^2\kappa^2/mZe^2$  гораздо больше постоянной решетки.

Энергетическая серия (2) определяется только параметрами полупроводника и не зависит от химической природы доноров. Однако на расстояниях порядка постоянной решетки потенциал примесного центра отличается от кулоновского. Поэтому энергия основного состояния от боровской отличается. Это отличие называют химическим сдвигом  $\Delta_0$ . В ряде полупроводников для разных примесей влияние короткодействующей части потенциала относительно мало:  $|\Delta_0| \ll E_B$ . Такие примеси называются мелкими. Влиянию сильного магнитного поля на спектр таких примесей и посвящена настоящая работа.

Величину химического сдвига можно определить с помощью метода магнитной спектроскопии [2]: измеряется поглощение электромагнитной волны фиксированной энергии при изменении приложенного к образцу постоянного магнитного поля  $H$ . Резонанс — совпадение энергии связи  $\epsilon(H) = E_B(H) + \Delta(H)$  с квантом света — происходит для доноров разной химической природы при разных магнитных полях. Зависимость боровской энергии от магнитного поля  $E_B(H)$  совпадает с соответствующей зависимостью для атома водорода (надо только заменить массу свободного электрона на эффективную, а величину  $e^2$  на  $Ze^2/\kappa$ ) и неоднократно вычислялась [3]. Что касается зависимости химсдвига от поля, то для него, как правило, используется теория возмущений [4]

$$\Delta(H) = \left| \frac{\Psi_{H=0}(0)}{\Psi_{H=0}(0)} \right|^2, \quad (3)$$

где  $\Psi_H(r)$  — волновая функция боровского электрона в магнитном поле. Определяя экспериментально точку резонанса, можно с помощью (3) вычислить величину химсдвига  $\Delta_0$ .

В полупроводниках боровский радиус и магнитная длина  $\lambda = (c\hbar/eH)^{1/2}$  значительно превосходят межатомное расстояние. При этом воздействие короткодействующего потенциала на электрон характеризуется только одним параметром — длиной рассеяния на коре  $l$ . По порядку величины она сравнима с межатомным расстоянием, и поэтому  $|l| \ll a_B, \lambda$ .

Известно [5], что химсдвиг выражается через длину рассеяния следующим образом

$$\frac{\Delta_0}{2E_B} = 2 \frac{l}{a_B}. \quad (4)$$

Ниже нам будет удобно использовать эффективный потенциал Ферми [5, 6], т. е. такой короткодействующий потенциал  $U(r)$ , для которого выполняется условие

$$\frac{1}{2\pi} \int d^3r U(r) = \frac{\hbar^2}{2m} l. \quad (5)$$

В данной работе предполагаются выполненными неравенства

$$|l| \ll \lambda \ll a_B. \quad (6)$$

Условие  $\lambda \ll a_B$  предполагает, что магнитное поле сильное и позволяет использовать так называемое адиабатическое приближение [7], а неравенство  $|l| \ll \lambda$  — пренебречь воздействием магнитного поля на потенциал кора.

Оказывается, что при выполнении (6) имеется простое трансцендентное уравнение, определяющее энергию связи электрона на доноре в магнитном поле. Оно получено в следующем разделе.

Анализ этого уравнения показывает, что воздействие кора на спектр характеризуется одним безразмерным параметром  $\nu$

$$\nu \equiv \frac{a_B l}{\lambda^2}. \quad (7)$$

В случае малых  $\nu$ ,  $|\nu| < 1$  справедлива теория возмущений, применимо уравнение (3). С ростом  $|\nu|$  в области  $|\nu| \geq 1$  теория возмущений становится непригодной.

Интересной оказывается зависимость энергии уровня от поля в случае отталкивательного кора,  $\nu < 0$ . Известно [1, 6, 7], что без учета кора в сильном поле уровень углубляется. Наличие кора меняет ситуацию качественно. С ростом поля энергия увеличивается только в области  $|\nu| < 1$ , достигая при  $|\nu| \simeq 1$  максимального значения. При  $|\nu| \geq 1$  энергия уровня убывает по закону

$$\varepsilon(H) \simeq E_B \left( 1 + \frac{4}{|\nu|} \right). \quad (8)$$

Интересно, что энергия асимптотически стремится к  $E_B$ . Этот результат отличается от предсказания теории возмущений. Согласно (3),  $\varepsilon(H) \rightarrow 0$  при  $H \rightarrow \infty$ .

Результат (8) имеет простое физическое объяснение. С ростом поля волновая функция сжимается. При этом растет вклад в энергию как кулоновского потенциала, так и потенциала кора. Вначале вклад кулоновского потенциала доминирует, поэтому уровень углубляется. При достаточно сильном поле более важным оказывается короткодействующий потенциал, который при  $l < 0$  стремится вытолкнуть уровень.

Асимптотика уровня при  $\nu < 0$ ,  $|\nu| \geq 1$  определяется следующим обстоятельством. В сильном поле задача фактически сводится к одномерному движению электрона в кулоновском поле. Короткодействующий отталкивательный потенциал приводит к тому, что в сильном поле на вол-

новую функцию накладывается условие  $\Psi(0) \sim \text{const}/|v| \rightarrow 0$ . Следовательно, задача становится полностью аналогичной задаче о трехмерном атоме водорода (без магнитного поля).

При приложении к полупроводнику с металлической проводимостью магнитного поля теория предсказывает переход к активационной проводимости. При слабой компенсации это связано с вымораживанием электронов проводимости на доноры из-за увеличения боровской энергии в магнитном поле  $E_B(H) > E_B(H=0)$ . Однако, как уже было сказано, для полупроводника с примесями с мощным отталкивательным кором в сильном поле  $\epsilon(H) \sim E_B$ . Это может привести к отсутствию перехода металл—диэлектрик в магнитном поле.<sup>1</sup>

### 1. Адиабатическое приближение

Волновую функцию основного состояния  $\Psi(\rho, z)$  точного уравнения Шредингера следует разложить [6] по полной системе радиальных функций  $R_{n0}(\rho)$  уровней Ландау

$$\Psi(\rho, z) = \sum_n R_{n0}(\rho) \chi_n(z). \quad (9)$$

Здесь и ниже ось  $z$  выбрана вдоль поля  $H$ .

При  $a_B > \lambda$  расстояние между уровнями Ландау гораздо больше характерной боровской энергии, так что в разложении (9) можно оставить только член, соответствующий нулевому уровню Ландау. Эта процедура составляет суть адиабатического приближения [7]. При этом одномерная функция  $\chi_0(z)$  удовлетворяет одномерному уравнению Шредингера [6, 7]

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi_0}{dz^2} + \bar{W}(z) \chi_0 &= -\epsilon(H) \chi_0, \\ W \equiv V(r) + U(r), \quad \bar{W}(z) &= \int_0^\infty d\rho \rho W(\sqrt{\rho^2 + z^2}) R_{n0}^2(\rho), \\ \epsilon(H) &= \frac{\hbar^2}{m\lambda^2} - E(H). \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Здесь  $U$  — эффективный потенциал кора, удовлетворяющий условию (5). Поправки к адиабатическому приближению мы оценим в следующем разделе [8].

Энергию уровня  $\epsilon$  можно определить из условия непрерывности волновой функции и ее производной. Для этого вычислим логарифмическую производную волновой функции в области  $\lambda \ll z \ll a_B$ . При  $z \gg \lambda$  уравнение (10) совпадает с уравнением Шредингера кулоновской задачи, следовательно, волновая функция здесь кулоновская. Поскольку  $z \ll a_B$ , то кулоновскую функцию можно раскладывать по степеням малых расстояний. В результате находим [6]

$$\eta \equiv a_B \left. \frac{\chi_0'}{\chi_0} \right|_z \simeq - \left\{ k + 2 \left[ \ln \frac{2kz}{a_B} + \psi(1 - k^{-1}) + 2C \right] \right\}, \quad (11)$$

где  $k^2 \equiv E(H)/E_B$  — энергия в боровских единицах,  $C \approx 0.577 \dots$  — постоянная Эйлера,  $\psi(x)$  — логарифмическая производная гамма-функции.

Вычислим теперь ту же величину  $\eta$ , интегрируя (10) от нуля до  $z$ . Используя граничное условие  $\chi_0'(z \rightarrow 0)$ , находим

$$\eta \simeq \frac{2ma_B}{\hbar^2} \int_0^z \bar{W}(z) dz, \quad (12)$$

а поправочные члены при  $|L| \ll \lambda \ll z \ll a_B$  малы, как показано в следующем разделе. Отметим, что даже одномерное адиабатическое уравнение (10) при переходе к формуле (12) решено приближенно.

<sup>1</sup> Авторы благодарны А. Л. Эфросу, указавшему нам на эту возможность.

Интеграл с кулоновским потенциалом в выражении (13) легко вычисляется

$$\int_0^z \bar{V}(z') dz' \simeq -Z \frac{e^2}{z} \left[ \ln \frac{\sqrt{2}z}{\lambda} + \frac{C}{2} + 0 \left( \frac{\lambda^2}{z^2} \right) \right], \quad (13)$$

а вместо короткодействующего потенциала можно ввести длину рассеяния на эффективном потенциале кора (5), если только  $|L| \ll \lambda$ . В этом случае можно пренебречь воздействием магнитного поля на потенциал кора.

Из выражений (5), (11), (13) находим трансцендентное уравнение для определения энергии связи

$$\left. \begin{aligned} \Phi(k) &= 2 \ln \frac{a_B}{\sqrt{2}\lambda} + \frac{La_B}{\lambda^2}, \\ \Phi(k) &\equiv k + 2 \ln k + \Psi(1 - k^{-1}) + 3C. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Уравнение (14) — основной результат работы. Его правая часть зависит от двух существенных параметров задачи:  $\nu \equiv La_B/\lambda^2$ ,  $\ln a_B/\lambda$ . При  $\nu=0$  это уравнение сводится к адиабатическому уравнению Хасегавы—Ховарда [7] для определения энергии основного состояния атома водорода в магнитном поле. При этом асимптотическая зависимость энергии от магнитного поля описывается формулой

$$E_B(H) = E_B \ln^2 \frac{a_B^2}{2\lambda^2}, \quad (15)$$

которая справедлива при  $\ln a_B/\lambda \gg 1$ , когда величина  $\Phi(k) \simeq k \gg 1$ . Поправки к формуле (15) определяются параметром  $\lambda/a_B \ln a_B/\lambda \ll 1$  [8].

Интересно, что величина  $\nu$ , входящая в уравнение (14), может быть немалой по сравнению с логарифмом в области применимости (6). В этом случае химсдвиг  $\Delta(H)$  уже нельзя вычислять по теории возмущений (3). Ее область применимости оказывается ограниченной условием  $|\nu| < \ln(a_B/\lambda)$ , т. е. пока  $\Delta(H) < E_B(H)$ . При этом

$$\varepsilon \simeq E_B(H) \left[ 1 + \frac{4\nu}{\ln \frac{a_B}{\sqrt{2}\lambda}} \right]. \quad (16)$$

Последнее выражение справедливо при  $\ln a_B/\lambda \gg 1$  и совпадает с формулой теории возмущений (3), так как в этом случае  $\psi_H(0) \approx (2\pi\lambda^2)^{-1/2} \sqrt{k/a_B}$ , причем  $k \simeq 2 \ln a_B/\sqrt{2}\lambda$ .

На рисунке построены зависимости энергии основного состояния электрона на доноре в магнитном поле, полученная из (14) для двух исходных значений химсдвига  $\Delta_0/E_B = \pm 0.1$ . Там же для сравнения приведены аналогичные зависимости для атома водорода ( $\Delta_0=0$ ), полученная в адиабатическом приближении [7], и точного решения [3], полученного на ЭВМ. Мы полагаем, что точность нашего расчета такая же, как и в случае  $\Delta_0=0$ .

Из рис. 1 видно, что теория возмущений нарушается при  $|\nu| \sim 1$ . Для отрицательных значений химсдвига  $\Delta_0 < 0$  энергия уровня немонотонно зависит от магнитного поля. В достаточно сильном поле, когда  $|\nu| \gg 1$ , в левой части уравнения (14) главным становится член, пропорциональный  $\psi$ -функции, что приводит к падающей от магнитного поля зависимости (8).

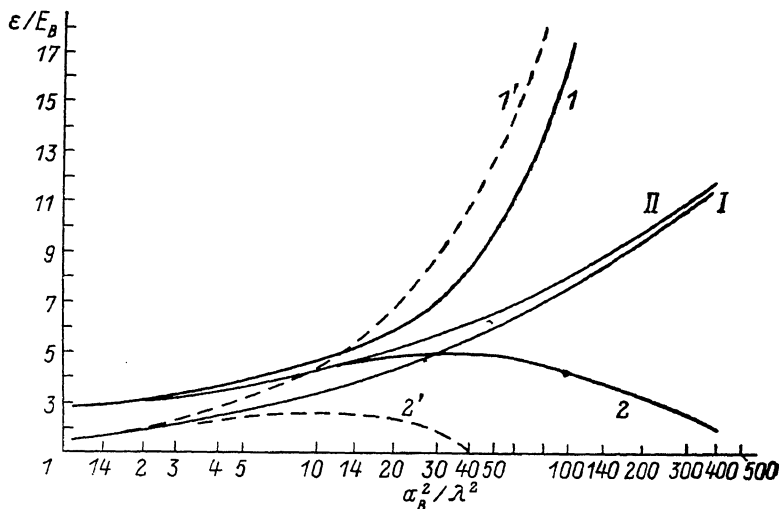
Напомним, что построенная теория справедлива при  $|L| \ll \lambda \ll a_B$ . Поправочные члены оценены в следующем разделе. В очень сильном поле, когда магнитная длина сравнивается с длиной рассеяния  $\lambda/|L| \sim 1$ , одномерное приближение становится несправедливым, и необходимо решить точное уравнение.

## 2. Поправки к адиабатическому приближению

Оценим поправки к энергии от учета верхних зон Ландау. Если подставить в полное трехмерное уравнение Шредингера [6] точное разложение (9), то для продольных функций  $\chi_n(z)$  получится система уравнений

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi_n}{dz^2} + \sum_q \bar{W}_{nq}(z) \chi_q &= -\left[ \frac{\hbar^2}{m \lambda^2} \left( n + \frac{1}{2} \right) - E(H) \right] \chi_n, \\ \bar{W}_{nq}(z) &= \int_0^\infty d\rho \rho R_{n0}(\rho) W(\sqrt{\rho^2 + z^2}) h_{q0}(z). \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Отброшенные в адиабатическом приближении члены от верхних зон в уравнении для  $\chi_0(z)$  можно учесть по теории возмущений. Характерные значения  $z^*$  для потенциала (1), как будет видно,  $z^* \sim \lambda$ , а для коротко-



Зависимость уровня энергии донора от магнитного поля для двух значений химсдвига:  $\Delta_0/E_B = \pm 0.1$  — кривые 1, 2 соответственно — решения уравнения (14).

Кривые 1', 2' — результаты теории возмущений (3) для тех же значений химсдвига. Кривые I, II — соответственно точный [3] и адиабатический [2] расчеты энергии основного состояния электрона в атоме водорода ( $\Delta_0 = 0$ ) от магнитного поля.

действующего потенциала —  $z^* \sim |l|^{1/2}$ . При этом в первом порядке по членам, пропорциональным  $\chi_q(z)$ , следует для оценки поправки в уравнение (10) вставить потенциал

$$\frac{1}{\hbar \omega_c} \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q} \bar{W}_{q0}^2(z), \quad \hbar \omega_c \equiv \frac{\hbar^2}{m \lambda^2}, \quad (18)$$

что приводит к поправке для энергии

$$\varepsilon^{(1)} \sim \frac{1}{\hbar \omega_c} \sum_{q=1}^{\infty} \frac{1}{q} \int_{-\infty}^{\infty} dz \chi_0^2 \left[ \int_0^\infty d\rho \rho (V + U) R_{q0} R_{00} \right]^2. \quad (19)$$

При этом для кулоновского потенциала

$$\varepsilon_{Kyl}^{(1)} \sim \frac{1}{\hbar \omega_c} \chi_0^2(0) \lambda e^4 / \lambda^2 \sim \frac{\lambda}{a_B} \ln \frac{a_B}{\lambda} E_B, \quad (20)$$

как уже показано было ранее [8]. Для короткодействующего потенциала в первом порядке по  $|l|/\lambda$  из (19) получим

$$\varepsilon_{K0P}^{(1)} \sim e^2 \chi_0^2(0) l / \lambda \sim \frac{l}{\lambda} \ln \frac{a_B}{\lambda} E_B. \quad (21)$$

Таким образом, поправки от учета верхних зон Ландау определяются формулами (19)—(20), в оценке мы положили  $\chi_0(0) \sim (k/a_B)^{1/2}$ .

Кроме того, напомним, что одномерное уравнение (10) было решено приближенно. При переходе к формуле (12) были отброшены член, пропорциональный  $[(\chi'/\chi)|_z]^2$ , и член, пропорциональный энергии, по сравнению с  $m\bar{W}/\hbar^2$ . Это справедливо при

$$\ln^2 \frac{z}{\lambda} + 0 \left( \frac{\lambda^2}{z^2} \right) < \frac{a_B}{\lambda}, \quad \frac{a_B l}{\lambda^2} \ln \frac{z}{\lambda} < \left( \frac{a_B}{\lambda} \right)^2,$$

как следует из формул (12), (10). Видно, что решено адиабатическое уравнение при тех же приближениях, в которых оно справедливо.

Авторы признательны А. Л. Эфросу за постановку задачи, многочисленные и полезные обсуждения. Благодарим Ал. Л. Эфроса за обсуждение результатов работы и консультации по литературным источникам.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979. 416 с.
- [2] Голубев В. Г., Иванов-Омский В. И. В кн.: Материалы XII зимней школы по физике полупроводников. Л., 1986, с. 146—179.
- [3] Makado P. C., McGill N. C. J. Phys. C, 1986, vol. 19, N 6, p. 873—885.
- [4] Cabib D., Fabri E., Fiori G. Sol. St. Commun., 1971, vol. 9, N 17, p. 1517—1520.
- [5] Зельдович Я. Б. ФТТ, 1959, т. 1, № 11, с. 1638—1641.
- [6] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- [7] Hasegawa H., Howard R. E. J. Phys. Chem. Sol. 1961, vol. 21, N 1, p. 179—193.
- [8] Avron J. E., Herbst I. W., Simon B. Phys. Rev. A, 1979, vol. 20, N 6, p. 2287—2296.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
1 февраля 1988 г.