

- [1] Lyon S. A. // J. Luminescence. 1986. V. 35. N 3. P. 121—154.
 [2] Shah J. // IEEE J. Quantum electron. 1986. V. 22. N 9. P. 1728—1749.
 [3] Kash K., Shah J. // Appl. Phys. Lett. 1984. V. 45. N 4. P. 401—403.
 [4] Lobentanzner H., Rühle W. W., Pollard H.-J., Stolz W., Ploog K. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N. 5 P. 2954—2957.
 [5] Балтрамеюнас Р., Жукаускас А., Латинис В., Юршенас С. // Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 46. № 2. С. 67—69.
 [6] Балтрамеюнас Р., Жукаускас А., Латинис В., Юршенас С. // Лит. физ. сб. 1989. Т. 29. № 2. С. 193—201.
 [7] Латинис В., Стяпанкявичюс В., Юршенас С. // Лит. физ. сб. 1988. Т. 28. № 1. С. 94—95.
 [8] Bron W. E., Kuhl J., Rhee B. K. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 10. P. 6961—6971.
 [9] Вербин С. Ю., Пермогоров С. А., Резницкий А. Н., Пендюк Св. А., Таленский О. Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 84—88.

Вильнюсский университет
Вильнюс

Поступило в Редакцию
13 марта 1989 г.

УДК 539.293.6

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989
Solid State Physics, vol. 31, N 11, 1989

МЕТОД КВАНТОВОГО ДЕФЕКТА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМОРФНОГО As_2S_3

В. В. Стружкин

Метод квантового дефекта с успехом применяется для вычисления сечений фотоионизации примесей в полупроводниках [1]. В данной работе этот метод используется для моделирования электронных состояний, определяющих оптические свойства аморфного As_2S_3 в интервале энергий 1—14 эВ. Основным аргументом в пользу применения этого метода может служить сильная локализация состояний, определяющих процессы оптического поглощения в As_2S_3 [2]. Вероятность фотоионизации связана простыми соотношениями с мнимой частью диэлектрической проницаемости ϵ_2 , поэтому, вычислив эту вероятность, мы определим ϵ_2 и все интересующие нас свойства: действительную часть диэлектрической проницаемости, коэффициент преломления и т. д. Известно, что

$$\epsilon_2 = \alpha \eta \nu / \omega, \quad (1)$$

где α — коэффициент поглощения, η — коэффициент преломления, ν — скорость света в среде. В [1] показано, что

$$\alpha = W_{\text{abs}} / (vN), \quad (2)$$

где W_{abs} — вероятность фотоионизации, N — число фотонов в единице объема. Там же [1] приводится формула

$$W_{\text{abs}} = 8\pi^2 (e^2/m) (1/\eta) (N/\omega) \frac{|\langle f | p_x | i \rangle|^2}{2m} N_i N(E_f), \quad (3)$$

e , m — заряд и масса электрона; $\langle f | p_x | i \rangle$ — матричный элемент импульса; $\langle f |$ — конечное состояние; $| i \rangle$ — начальное состояние; $N(E_f)$ — плотность конечных состояний, N_i — концентрация начальных состояний.

В результате простых преобразований получаем

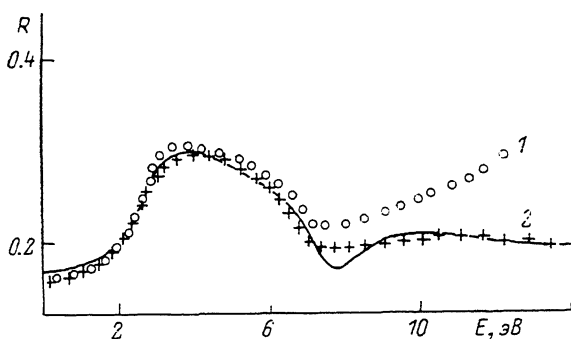
$$\epsilon_2 = \pi \omega_p^2 (|\langle f | p_x | i \rangle|^2 / (m\omega^2)) N(E_f), \quad \omega_p^2 = 4\pi N_i e^2 / m. \quad (4)$$

$$\langle f | p_z | i \rangle = \int \exp(ikr) p_z F_\nu(r) d^3r, \quad (5)$$

z — направление поляризации электромагнитной волны; конечное состояние — плоская волна $\exp(ikr)$, а начальное состояние — волновая функция квантового дефекта, согласно [1, 3],

$$\begin{aligned} F_\nu(r) &= (1/\sqrt{4\pi}) P_\nu(r), \\ P_\nu(r) &= N_\nu r^{\nu-1} \exp(-r/(\nu a^*)), \\ N_\nu &= (2/(\nu a^*))^{\nu+1/2} (\Gamma(2\nu+1))^{-1/2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $0 \leq \nu \leq 1$, $1/\nu^2 = E_b/Ry^*$, a^* — эффективный боровский радиус, E_b — энергия связи, Ry^* — эффективный Ридберг. Вычисление матрич-



Зависимость коэффициента отражения от энергии кванта света для аморфного As_2S_3 . Сплошная линия — эксперимент [6], точки 1, 2 — расчет для модельного спектра при $\nu=1$ и 0.8 соответственно.

ного элемента (5) проведено в [3], но в нормировке $F_\nu(r)$ и на последнем этапе вывода формулы допущены ошибки. Правильный вид матричного элемента следующий:

$$\frac{|\langle f | p_z | i \rangle|^2}{m^2 \omega^2} = (4\pi/3) [2^{2\nu+1} \Gamma(\nu+1)^2 / \Gamma(2\nu+1)] [(\nu a^*)^5 / (y(1+y)^{\nu+1})] f_1(y), \quad (7)$$

$$f_1(y) = [\sin[(\nu+1) \arctan(y^{1/2})] / y^{1/2} - (\nu+1) \cos[(\nu+2) \arctan(y^{1/2})] / (1+y)^{1/2}]^2,$$

где

$$y = (\nu k a^*)^2 = (\hbar\omega - E_b) / E_b = \hbar^2 k^2 / 2m^*.$$

Случай $\nu=1$ соответствует водородоподобной волновой функции, а случай $\nu=0$ — более сильнолокализованной волновой функции, которая аналогична волновой функции так называемой δ -образной модели Луковского [4]; при этом, если ввести вспомогательную функцию $g(y)$ согласно

$$\frac{|\langle f | p_z | i \rangle|^2}{m^2 \omega^2} = (4\pi/3) [(\nu a^*)^5 / y^{1/2}] |g(y)|^2,$$

то в модели Луковского

$$g(y) = 8y^{3/2} / (1+y)^4$$

и нетрудно показать, что при $\nu=0$ формула (7) приводит к тому же результату. Автор работы [3] не смог получить такого совпадения с моделью Луковского из-за ошибок при вычислении матричного элемента.

Формулы (4), (7) использовались нами для подгонки модельного спектра $\epsilon_2(\omega)$ под экспериментальный. При этом состояния ниже зоны проводимости на 2.5 эВ описывались этими формулами с единственным подгоночным параметром a^* для различных ν . Точно так же строился модельный спектр $\epsilon_2(\omega)$ для состояний ниже зоны проводимости на 7 эВ. Экспе-

риментальный спектр ϵ_2 можно найти в работе [5]. Кроме того, нами был вычислен с помощью анализа Крамерса—Кронига спектр ϵ_2 из спектров отражения [6] и было получено практически полное совпадение с результатами работы [5].

Как видно из рисунка, при $\nu=1$ модель лучше описывает эксперимент. Это связано с тем фактом, что для $\nu < 1$ более сильная локализация волновых функций начального состояния при 2.5 эВ приводит к завышенным значениям ϵ_2 при $\hbar\omega > 8$ эВ. Кроме того, состояния при 7 эВ хуже описываются моделью, что неудивительно, так как они значительно отличаются по характеру от состояний при 2.5 эВ [2] и вряд ли их можно описывать простой волновой функцией квантового дефекта.

В рамках простой модели квантового дефекта удается удовлетворительно описать экспериментальные спектры отражения аморфного As_2S_3 в интервале энергий 0—7 эВ. Кроме того, выбор волновой функции конечного состояния в виде плоской волны является, по-видимому, неплохим приближением для рассмотрения оптических переходов в аморфном As_2S_3 .

Список литературы

- [1] Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М.: Мир, 1986. 304 с.
- [2] Bishop S. G., Shevchik N. F. // Phys. Rev. 1975. V. B12. N 4. P. 1567—1578.
- [3] Bebb Н. // Phys. Rev. 1969. V. 184. N 3. P. 1116—1126.
- [4] Lucovsky G. // Sol. St. Comm. 1965. V. 3. N 9. P. 299—302.
- [5] Drews R. E., Emerald R. L., Slade M. L. // Sol. St. Comm. 1972. V. 10. N 1. P. 293—296.
- [6] Zallen R., Drews R. E., Emerald R. L., Slade M. L. // Phys. Rev. Lett. 1971. V. 26. N 25. P. 1564—1567.

Институт физики высоких давлений
АН СССР
Троицк
Московская область

Поступило в Редакцию
4 апреля 1989 г.

УДК 621.535.372

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989
Solid State Physics, vol. 31, N 11, 1989

О НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СПЕКТРАХ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КРИСТАЛЛОВ ZnO В ОБЛАСТИ ЭКСИТОННОГО РЕЗОНАНСА

В. М. Арутюнян, А. Л. Маргарян

Идентификация значительного количества полос люминесценции кристаллов ZnO в близкраевой области спектра затруднена ввиду нелинейности процессов, обуславливающих эти полосы. При регистрации фотолюминесценции (ФЛ) возникает необходимость одновременного и строгого учета как температуры кристалла, так и уровня оптической накачки. Настоящая работа посвящена изучению этих вопросов.

Люминесценция возбуждалась импульсным азотным лазером (длина волны 3371 Å), интенсивность которого строго контролировалась с точностью 1—2 % от заданного ее значения, достигающего ~200 МВт/см². Излучение анализировалось с помощью монохроматора ДФС-12 (линейная дисперсия 5 Å/мм) с использованием фотоэлектрической системы записи спектров. Температура изменялась в интервале 4.2—50 К. Спектры ФЛ были получены также по схеме возбуждения, описанной в [1] (регистровалось излучение от той части образца, на которую не попадает возбуждающий свет). Однако изменения формы спектра или же энергетического сдвига максимума в этом случае не наблюдалось. Следовательно,