

АНИЗОТРОПИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В КРИСТАЛЛАХ С ВЫРОЖДЕННЫМ СПЕКТРОМ

Ф.В.Кусмарцев, Э.И.Рашба

Показано, что в кристаллах с вырожденными сферическими зонами оптимальные флуктуации, формирующие хвосты плотности состояний в запрещенной зоне, несферичны – они вытянуты или сплюснены.

Примеси и дефекты порождают в полупроводниках хвосты плотности состояний $\rho(E)$, глубоко проникающие в запрещенную зону. Для их описания Гальпериным и Лэксом¹, Циттарцем и Ланжером² и Лифшицем³ был развит метод оптимальной флуктуации (ОФ). Он получил развитие в последующих работах; современное состояние вопроса суммировано в⁴⁻⁶. Во всех работах, выполненных методом ОФ, предполагается, что при сферически симметричных зонах ОФ расположения примесей также сферически симметрична. Ниже показано, что это предположение справедливо только для невырожденных зон. Напротив, для вырожденных сферических зон во всей квантовой области оптимальными оказываются анизотропные флуктуации – значительно вытянутые либо сплюсненные. Для полупроводников $A_{III}B_V$ типичным является энергетический спектр со сферическими зонами: невырожденной зоной проводимости и вырожденной валентной зоной¹). Применительно к ним наш результат означает, что хвост зоны проводимости формируется симметричными флуктуациями, а значительно более протяженный (из-за большой массы тяжелых дырок) хвост валентной зоны формируется преимущественно несимметричными флуктуациями.

В квантовой области $r_\psi \gg r_c$ (r_ψ – радиус ψ -функции, r_c – корреляционный радиус случайного потенциала $U(\mathbf{r})$). Задача особенно проста для белого шума $\langle U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}') \rangle = B_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. В этом случае согласно стандартной процедуре метода ОФ^{5,6} нахождение хвостов $\rho(E)$ сводится к решению уравнения Шредингера:

$$H_\beta \Psi = \{ T - \beta B_0 (\Psi^*(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r})) \} \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь T – оператор кинетической энергии, который для зоны с моментом (спином) S является операторной матрицей $(2S + 1) \times (2S + 1)$, Ψ – нормированная векторная (спинорная) волновая функция; круглые скобки в (1) означают скалярное произведение. Произведение $(\Psi^*(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}))$ является форм-фактором флуктуации. Оператор, стоящий в (1) слева, имеет бесконечное количество отрицательных собственных значений ϵ_n , возрастающих по модулю с ростом n . Фактор β в (1) является лагранжевым множителем, который подбирается так, чтобы ϵ_1 – наименьшее по модулю собственное значение H_β , равнялось E .

¹) Рифлением зон, обязанным кубической симметрии кристалла, пренебрегаем.

стоящему справа ($\epsilon_1 = E$). При этом

$$\rho(E) \propto \exp(-S(E)), \quad S(E) = \frac{1}{2} B_0 \beta^2(E) \int (\Psi^*(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}))^2 d^3r. \quad (2)$$

Уравнение (1) определяет стационарные точки функционала

$$\mathcal{F}[\Psi] = \int \left\{ (\Psi^*, T\Psi) - \frac{1}{2} \beta B_0 (\Psi^*, \Psi)^2 \right\} d^3r. \quad (3)$$

Записывая для него теорему вириала^{7, 8} получаем

$$\int (\Psi^*(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r}))^2 d^3r = - \frac{4E}{\beta B_0}, \quad \mathcal{F} = |E| \quad (4)$$

и

$$S(E) = 2|E| \beta(E). \quad (5)$$

Все вышеизложенное относится к произвольному виду оператора T . В частности, для невырожденной зоны $T = -\hbar^2/2m \nabla^2$, $\Psi(\mathbf{r})$ — скалярно, и подстановка $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(|\mathbf{r}|)$ является самосогласованной. При $S = 1$ или $3/2$ оператор T является линейной функцией двух сферических инвариантов: ∇^2 и $(S\nabla)^2$, где $S = \{S_x, S_y, S_z\}$ — спиновые матрицы для спина S ; коэффициенты стоящие при них, известным образом связаны с массами тяжелых и легких дырок (m_h и m_l , соответственно). В этом случае предположение о сферичности ОФ не является самосогласованным: оно приводило бы к тому, что $\Psi(\mathbf{r})$ — сферические векторы, но прямое вычисление показывает, что для сферических векторов с моментом $J \neq 0$ выражение (Ψ^*, Ψ) не является сферически симметричным. Здесь происходит спонтанное нарушение симметрии, типичное для векторных нелинейных уравнений¹⁾.

Из сопоставления отдельных членов в (1) следует, что $\beta(E) \sim \hbar^3/B_0 m_h^{3/2} E^{1/2}$ и зависит от отношения масс $\mu = m_h/m_l$. Поэтому $S(E)$ удобно представить в виде

$$S(E) = S_0(E) f(\mu), \quad S_0(E) \approx 13,3 \frac{\hbar^3 E^{1/2}}{B_0 m_h^{3/2}}, \quad f(\mu) = \left(\frac{m_h}{m_{\text{ЭК}}(\mu)} \right)^{3/2}. \quad (6)$$

Здесь $S_0(E)$ — значение $S(E)$ для невырожденной зоны с массой m_h , а $m_{\text{ЭК}}(\mu)$ — “эквивалентная” масса, позволяющая найти S по S_0 .

Нами проведен численный расчет ОФ в предположении, что они сохраняют ось и центр симметрии; при этом квантовые состояния классифицируются по проекции момента M на ось симметрии Oz . Так как до потери сферической симметрии ϵ_1 отвечает уровню с $J = S$, рассматривались только значения $M = 0, \pm 1$ и $M = \pm 1/2, \pm 3/2$. Результаты представлены на рис. 1 и рис. 2; предполагается, что, как обычно, спиральность тяжелых дырок равна $\lambda = \pm 1$ (при $S = 1$) и $\lambda = \pm 3/2$ (при $S = 3/2$). Из рис. 1, а видно, что $f(\mu)$ для $M = 0$ лишь ненамного меньше, чем для $M = \pm 1$; для $M = \pm 1/2$ и $M = \pm 3/2$ (рис. 2, а) обе кривые практически совпадают. Между тем анизотропия возникающих состояний велика, как это видно из рис. 1, б и рис. 2, б. На них отложен параметр анизотропии $A(\mu) = z_0/\rho_0$, где $z_0(\mu)$ и $\rho_0(\mu)$ — координаты точек на оси Oz и в плоскости $z = 0$, где (Ψ^*, Ψ) спадает вдвое (в сравнении с точкой $\mathbf{r} = 0$). Состояния с различными проекциями M имеют противоположную анизотропию (см. рис. 2, б).

Мы вычислили также $f(\mu)$, ограничиваясь ОФ в классе сферически симметричных функций. Для этого достаточно было в (1) заменить

$$(\Psi^*(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r})) \Rightarrow \langle (\Psi^*(\mathbf{r}), \Psi(\mathbf{r})) \rangle_{\Omega};$$

1) Оно тесно связано с эффектом Яна — Теллера в теории автолокализации (см. ⁹⁾); в частности, высота автолокализационного барьера $W = W_0 f^2(\mu)$ (см. (6)).

косые скобки означают усреднение по углам. Результаты показаны на рис. 1, а и рис. 2, а пунктиром — $f(\mu)$ увеличивается, но незначительно.

Итак, сферические флуктуации не являются ОФ, аксиальные флуктуации отвечают меньшим $f(\mu)$. Если исключить предположение, что ОФ лишены и осевой симметрии, то из рис. 1 и рис. 2 следует, что имеется очень широкий класс флуктуаций, дающих близкие значения $f(\mu)$. Причина этого неясна, но из полученного результата следует, что предэкспоненциальный фактор в $\rho(E)$ велик, и что вычисление его является крайне трудным.

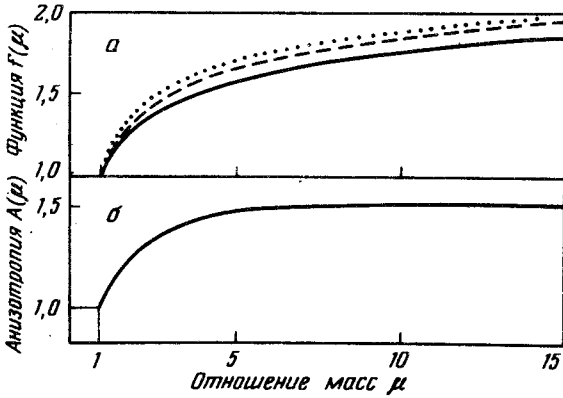


Рис. 1

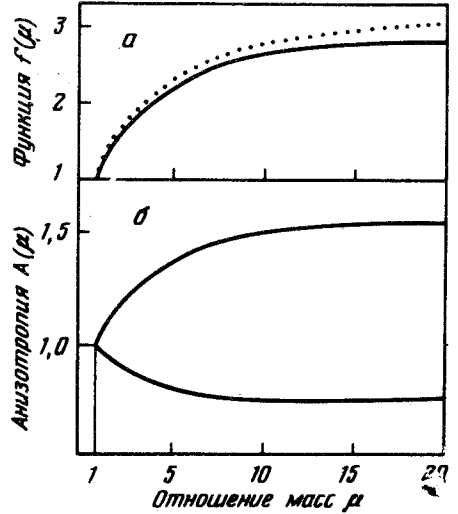


Рис. 2

Рис. 1. Зависимости $f(\mu)$ и $A(\mu)$ для зоны с $S = 1$: а — сплошная кривая — $M = 0$, штриховая — $M = \pm 1$ (несимметричные флуктуации), пунктир — сферически симметричная флуктуация; б — кривая $A(\mu)$ для $M = 0$

Рис. 2. Зависимости $f(\mu)$ и $A(\mu)$ для зоны с $S = 3/2$: а — сплошная кривая — несимметричные флуктуации ($M = \pm 1/2$ и $M = \pm 3/2$); пунктир — сферически симметричная флуктуация; б — верхняя кривая — $M = \pm 1/2$, нижняя — $M = \pm 3/2$. Если для тяжелых дырок $\lambda = \pm 1/2$, кривые, почти не изменяясь, меняются местами

Наиболее важный и физически интересный результат состоит в том, что хвосты формируются в основном за счет сильно анизотропных флуктуаций. Он ставит вопрос о нахождении экспериментальных методов для их прямого обнаружения. Очевидно, что анизотропия может непосредственно проявляться только в эффектах, описываемых тензорами ранга $n > 2$. Например, индикатрисса резонансного рэлеевского рассеяния в области длинноволнового хвоста поглощения, отвечающего френкелевским экситонам ($S = 1$), должна выходить на закон $\cos^2 \gamma + 1/2$ при больших $|E|$, когда $S_0(E)/(f_{\pm 1/2} - f_0) \gg 1$, так как в этих условиях "выживут" лишь диполи с $M = 0$; γ — угол между электрическими векторами падающего и рассеянного света. При меньших $|E|$ возрастет вклад других рассеивателей, например, сферических, приводящих в закону $\cos^2 \gamma$. Могут быть использованы методы поляризованной люминесценции¹⁰, поляризованного индуцированного поглощения и т. д. Можно ожидать, что в образцах с уровнем Ферми в области хвоста $\rho(E)$ одноосные деформации будут создавать, вследствие перезаполнения уровней, искусственную анизотропию со значительной "памятью".

В классической области $r_\psi \ll r_c$, где $\ln \rho \propto -E^2$, ОФ остаются сферически симметричными.

Литература

1. Halperin B.I., Lax M. Phys. Rev., 1966, 148, 722.
2. Zittarz J., Langer J.S. Phys. Rev., 1966, 148, 741.

3. Лифшиц И.М. ЖЭТФ, 1967, 53, 743.

4. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников, М.: Наука, 1979.

5. Бонч-Бруевич В.Л. и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников, М.: Наука, 1981.

6. Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастур Л.А. Введение в теорию неупорядоченных систем, М.: Наука, 1982.

7. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов, М.-Л. ГИТТЛ, 1951; § 8.

8. Рашба Э.И. "Excitons" ed. by E.I.Rashba and M.D.Sturge (North Holland. Publ. Comp.) 1982, p. 543.

9. Кусмарцев Ф.В., Рашба Э.И. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, 164.

10. Феофилов П.П. Поляризованная люминесценция атомов, молекул и кристаллов, М.: ГИФМЛ, 1959.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
15 декабря 1982 г.