

ДОНОРЫ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ И УПРУГИЙ МАГНИТОПРИМЕСНЫЙ РЕЗОНАНС В АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

С. М. Дикман*, В. М. Жилин

*Институт физики твердого тела Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 6 февраля 1997 г.

Исследована возможность резонанса при упругом внутримолекулярном рассеянии в полупроводниках n -типа, который связан с пересечением (в силу анизотропии эффективной массы) уровней энергии возбужденных состояний мелкого донора, рассматриваемых как функции магнитного поля. Гибридизация состояний различной четности в окрестности пересечения обуславливает появление отличного от нуля дипольного момента возбужденного примесного атома и, соответственно, дальнедействующего потенциала, приводящего к особенности в транспорте носителей. Рассчитана нижняя часть спектра доноров в зависимости от магнитного поля в Si при $\mathbf{B} \parallel (001)$ и в Ge при $\mathbf{B} \parallel (111)$ или $\mathbf{B} \parallel (110)$. Пересечение возникает в Ge в диапазоне $9.9 \text{ Тл} < B < 16.7 \text{ Тл}$ в зависимости от ориентации поля и в Si в диапазоне $10.5 \text{ Тл} < B < 37.7 \text{ Тл}$. Рассчитаны характерное время продольной релаксации и поперечная проводимость, определяемые рассеянием на возбужденных донорах в условиях гибридизации состояний.

1. ВВЕДЕНИЕ

В предлагаемой работе мы исследуем собственные состояния мелкой примеси (донора) и определяемый рассеянием на ней транспорт носителей заряда в квантовом магнитном поле. Такое рассеяние, как известно, имеет ряд особенностей магнитосопротивления, носящих общее название магнитопримесных резонансов [1, 2]. Прежде всего — это неупругие резонансы, появляющиеся в том случае, когда разность энергий между возбужденным и основным состояниями примеси оказывается кратной циклотронной энергии в зоне проводимости [3–5]. Неупругим резонансом другого типа является своеобразная особенность рассеяния, обнаруженная в теллуре в магнитном поле, при котором первый (возникающий из-за междолинного расщепления состояния $1s$) и второй (состояние типа $2p_-$) уровни возбуждения акцептора эквидистантны [6]. Наконец, предсказан теоретически [7], но пока не наблюдался эффект упругого междолинного рассеяния на примесном потенциале в магнитных полях, отвечающих условию совпадения энергии в двух неэквивалентных долинах. Подчеркнем, что основной целью данной работы является теоретическое исследование совершенно нового резонанса, на возможность которого указывалось ранее [8, 9]. Такой резонанс возникает уже при внутримолекулярном рассеянии в объемных полупроводниках n -типа и связан с пересечением (в силу анизотропии эффективной массы) $2s$ - и $2p_-$ -подобных уровней энергии E_{2s} и E_{2p_-} возбужденных состояний донора, рассматриваемых как функции магнитного поля. Значения поля, соответствующие пересечениям, представляют собой своеобразные точки магнитного вырождения. В свою очередь, это приводит к появлению отлично-

*E-mail: dickmann@issp.ac.ru

го от нуля дипольного момента возбужденного примесного атома и, следовательно, к возникновению дальнедействующего потенциала, убывающего как $1/r^2$ и приводящего к аномалии в рассеянии электронов. Исследование явления включает прежде всего два вопроса: во-первых, определение значений магнитного поля, отвечающих резонансу и, во-вторых, изучение поведения низкотемпературной подвижности вблизи такой особенности.

Как известно, первая проблема сводится к расчету состояний мелкой примеси в невырожденной зоне в сильном магнитном поле и, очевидно, имеет самостоятельный интерес. Она изучалась в ряде работ как экспериментально (в [10–12] для Si, в [13] для Ge и GaAs), так и теоретически (в [14] для Si с помощью теории возмущений, в [15, 16] использовался вариационный метод применительно к Ge). Интересно, что теория в данном случае сводится к комбинации двух хорошо известных задач одночастичной квантовой механики: задачи об атоме водорода в сильном магнитном поле (так называемый квадратичный эффект Зеемана [17–29]) и задачи о доноре с одноосной анизотропией эффективной массы [30–34]. В обоих случаях уравнение Шредингера является двумерным в силу наличия аксиальной симметрии, но решить его аналитически не удастся. Малоприменимыми являются и асимптотические формулы, получаемые в предельных случаях больших и малых безразмерных параметров, характеризующих величину магнитного поля или анизотропию. Так, в квадратичном эффекте Зеемана параметром является приведенное к безразмерному виду согласно критерию Элиота–Лудона [23] магнитное поле $\mathcal{B} = (\hbar^3 \kappa^2 / e^3 m^2 c) |\mathbf{B}|$ (\mathbf{B} — поле обычной размерности, κ — статическая диэлектрическая проницаемость, m — эффективная масса). Ряд теории возмущений по \mathcal{B}^2 в определении волновых функций состояний дает удовлетворительный результат лишь при $\mathcal{B} < 0.1$ – 0.15 [14, 22], а асимптотическое решение в сильных полях [23] справедливо, если большой является величина $\ln \mathcal{B}$, что, во всяком случае для Si, Ge и GaAs, экспериментально недостижимо. Похожая ситуация возникает и с величиной $\gamma = m_{\perp} / m_{\parallel}$, определяющей анизотропию. Для малых γ реальным параметром фактически является $\gamma^{1/3}$ (см. [30]), и даже для германия (в котором $\gamma = 0.05134$) асимптотический ответ, найденный при $\gamma \rightarrow 0$, дает большую ошибку.

Первоначально для приближенного решения упомянутых задач использовался вариационный метод (см., например, [15–21, 30–32]), дающий хороший результат для уровней энергии $E_i(B)$, но, как правило, несмотря на наглядность получаемого ответа непригодный для определения волновых функций состояний. Убедительно это продемонстрировал Турбинер в работе [21], сравнивая найденное по теории возмущений значение квадрупольного момента Q_{zz} атома водорода в основном состоянии в поле $\mathcal{B} = 0.1$ с соответствующими значениями, рассчитанными на пробных волновых функциях различного типа, определяемых в ходе решения вариационной задачи. Оказывается, что ответ для Q_{zz} чрезвычайно сильно (вплоть до отличия по порядку величины) зависит от избранного типа пробных волновых функций, хотя вычисляемая энергия основного состояния к виду пробных функций почти не чувствительна. В сильных полях, начиная примерно с $\mathcal{B} \gtrsim 10$, более точным является так называемый адиабатический метод приближенного разделения переменных, использованный еще в [23]¹⁾ (см. также [24]), но в полупроводнике экспериментально достижимое значение \mathcal{B} оказывается, как правило, значительно ниже.

¹⁾ Применительно к задаче о доноре этот метод использовался и в [30].

Следует заметить, что существуют и интенсивно используются, в особенности в последние годы, так называемые точные методы. Это понятие в данном случае включает два типа решений. Первый тип представляет собой численное решение задачи, позволяющее в принципе (на «идеальном» компьютере) найти уровни энергии и волновые функции со сколь угодно большой точностью. Такие решения для атома водорода в магнитном поле получены в работах [25–28], а для донора в нулевом поле — в работе [33]. Второй тип точных решений — это уже фактически аналитическое решение задачи. Ответ для радиальной волновой функции при этом представляется в виде ряда по r , в котором коэффициенты разложения вычисляются аналитически рекуррентным образом. В достаточно общем виде этот метод изложен в статье [34]; там же продемонстрировано его приложение к задаче о доноре. Применительно к задаче об атоме водорода точное решение второго типа получено совсем недавно в работе [29], являющейся рекордной по числу найденных значащих цифр в расчете спектра энергии. Фактически решения второго типа означают резкое уменьшение времени вычислений по сравнению с работами [25–28, 33]. Точность всех этих расчетов значительно превышает точность самого метода эффективной массы, используемого в построении модели зонной структуры полупроводников, и для наших целей является, очевидно, чрезмерной. Кроме того, волновые функции состояний определяются в очень громоздком виде и для использования в дальнейших расчетах неудобны. Наконец, следует иметь в виду, что в нашем случае главная ось эллипсоида эффективной массы, вообще говоря, не совпадает по направлению с магнитным полем. Уравнение Шредингера, в принципе, становится трехмерным, так что точное решение как первого, так и тем более второго типа для комбинированной задачи в ближайшее время вряд ли вообще возможно.

Все это привело нас к необходимости вернуться при решении спектральной задачи к вариационному методу. Существенным моментом является выбор типа пробных волновых функций (разд. 2). Мы используем идеологию работ [20, 21], поэтому вид функций в значительной степени детерминирован симметрией уравнения Шредингера и асимптотическими свойствами искомых решений. В итоге такой подход во всяком случае дает возможность рассчитывать матричные элементы дипольного и квадрупольного моментов (что подтверждается рядом прямых и косвенных проверок) с точностью, вполне соответствующей рамкам используемого приближения эффективной массы. Результаты расчета приведены для Si и Ge в разд. 3 для двумерного уравнения Шредингера (эллипсоид эффективной массы ориентирован вдоль \mathbf{B}) и в разд. 4 для трехмерной задачи (поле \mathbf{B} перпендикулярно главной оси долины).

Наконец, разд. 5 настоящей работы посвящен второй из упомянутых выше проблем, т. е. собственно задаче о магнитопримесном резонансе. Для этого мы рассчитаем главный вклад в продольную и поперечную примесные проводимости вблизи точек пересечения уровней для кремния при $\mathbf{B} \parallel (001)$ и для германия при $\mathbf{B} \parallel (111)$ и $\mathbf{B} \parallel (110)$. Мы будем опираться на известную теорию [2, 35], построенную еще в работах [36–38]. Непосредственно воспользоваться известными ответами для точечного и кулоновского потенциалов, однако, нельзя, так как в нашем случае проводимость определяется рассеянием на незаряженной примеси, обладающей тем не менее дальнедействием. Мы рассмотрим случай, когда основной вклад дает рассеяние носителя на малые углы на расстоянии, значительно больших чем эффективный боровский радиус донора. Потенциал взаимодействия можно считать зависящим только от координат свободного носителя, и эффектами, связанными с задачей «трех тел» [39], можно пренебречь. В окончательном виде ответы найдены для Si в поле \mathbf{B} , направленном вдоль (001) .

В разд. 6 обсуждаются возможные варианты экспериментальной проверки. Заметим, что речь идет о резонансе только в терминологическом смысле. Если $\mathbf{B} \parallel z$, а электрическое поле $\mathbf{F} \parallel y$, то для магнитосопротивления в эксперименте следует ожидать появления немонотонности в зависимостях $\rho_{zz}(\mathbf{B})$ и $d\rho_{yy}(\mathbf{B})/dB$ вблизи соответствующего значения $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0$. Возникает также определенная сложность из-за необходимости обеспечить в образце присутствие свободных носителей одновременно с нейтральными (но возбужденными!) донорами. Тем не менее мы считаем, что предсказываемый эффект вполне наблюдаем по крайней мере для такого материала, как германий. В этом же разделе на основе известной уже картины спектра доноров предсказывается возможность резонансов других типов и указываются ожидаемые резонансные значения магнитного поля.

Часть результатов, относящихся к решению спектральной задачи для донора в Si, опубликована в сообщениях [8, 9]. Мы приводим их в разд. 3 и 4 без дополнительной ссылки наряду с расчетами волновых функций и уровней энергии других возбужденных состояний.

2. ВЫБОР ПРОБНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ. ОПИСАНИЕ МЕТОДА И ЕГО ОБОСНОВАНИЕ

Нам предстоит решить уравнение Шредингера в однородном поле \mathbf{B} с гамильтонианом эффективной массы для невырожденной зоны. Мы рассмотрим только наиболее симметричные случаи, когда магнитное поле строго параллельно либо строго перпендикулярно оси вращения эллипсоида эффективной массы, причем более подробно остановимся на первом варианте ориентации.

2.1. Магнитное поле направлено вдоль оси вращения эллипсоида эффективной массы (двумерная задача)

После замены $z = z'\sqrt{\gamma}$ и приведения величин к безразмерному виду уравнение Шредингера сводится к

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z'^2} - i\mathcal{B} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \mathcal{B}^2 \rho^2 - \frac{2}{\sqrt{\gamma z'^2 + \rho^2}} \right) \Psi = \mathcal{E} \Psi. \quad (2.1)$$

Анизотропия, таким образом, переносится на кулоновский член. Единичным значениям безразмерных величин соответствуют следующие числовые значения длины, энергии и магнитного поля²⁾:

$$a_B = \frac{\hbar^2 \kappa}{m_{\perp} e^2} \simeq (99.9, 31.7) \text{ \AA}, \quad \frac{m_{\perp} e^4}{2\hbar^2 \kappa^2} \simeq (4.68, 19.94) \text{ мэВ}, \quad (2.2)$$

$$\frac{e^3 m_{\perp}^2 c}{\hbar^3 \kappa^2} \simeq (6.59, 65.6) \text{ Тл}.$$

²⁾ Мы пользуемся следующими значениями эффективных масс $m_{\perp}/m_e = 0.0816, 0.1905$ $\gamma = 0.05134, 0.208$ соответственно для германия и кремния (см. [40]) и значениями $\kappa = 15.4, 11.4$, найденными на основании сопоставления с оптическими измерениями (см. [31, 33, 41]). Отметим, что эти значения κ заметно меньше измеренных емкостным методом [42].

Первое из чисел в каждой паре отвечает германию, второе — кремнию. Уравнение (2.1) записано в цилиндрических координатах и фактически двумерно, поскольку зависимость от угла φ определяется квантовым числом m ($\Psi \propto e^{im\varphi}$). Для обоснования выбора пробной волновой функции удобно тем не менее использовать также сферические координаты: $r = \sqrt{\rho^2 + z'^2}$, $\sin \theta = \rho/r$, $\cos \varphi = x/\rho$.

Рассмотрим прежде всего пробную волновую функцию основного состояния. Подставим в (2.1) $\Psi = e^{-\Phi(r)}$ и исследуем решение уравнения относительно Φ в асимптотической области больших r (при фиксированных углах θ и φ) или больших \mathcal{B} . Чтобы найти старшие члены разложения Φ по степеням r , можно пренебречь кулоновским потенциалом в (2.1). В результате нетрудно установить, что главный член разложения является квадратичным и определяется однозначно независимо от вида потенциала притяжения, а следующий за ним линейный член находится с точностью до постоянного (не зависящего от углов θ и φ) множителя, определяемого после сшивки с решением для конечных r ,

$$\Phi|_{r \rightarrow \infty} = \frac{1}{4}\rho^2|\mathcal{B}| + C|z'|. \quad (2.3)$$

Достаточно ясно, что члены разложения (2.3) непосредственно использовать для «конструирования» пробной волновой функции, описывающей решение для любых r и \mathcal{B} , было бы неправильно, поскольку первый член имеет искусственную особенность в нуле для \mathcal{B} , а второй — для z' . Эта трудность будет обойдена, если рассмотреть для пробной волновой функции не разложение Φ по r , а разложение квадрата Φ с двумя главными членами в виде

$$\Phi^2 \sim \frac{\mathcal{B}^2 \rho^4}{16} + \sqrt{1 + \mathcal{B}^2(u\rho^2 + wz'^2)}\sqrt{z'^2 + v^2\rho^2}. \quad (2.4)$$

Здесь уже u , w и v — варьируемые параметры, причем асимптотически должно быть

$$v|_{\mathcal{B} \rightarrow \infty} = w/u|_{\mathcal{B} \rightarrow \infty} = 0. \quad (2.5)$$

Следующим по старшинству после выписанных в (2.4) является квадратичный по r член. В то же время он будет главным в разложении Φ^2 вблизи $r = 0$ и определит линейный по r член в Φ для решения уравнения Шредингера в нулевом поле \mathcal{B} . Если $\gamma \neq 0$, то коэффициент при этом члене зависит от угла θ , причем зависимость, которая описывается обыкновенным дифференциальным уравнением по переменной θ , в принципе может быть найдена. Такой подход, однако, был бы неудобен и для вариационного метода являлся бы превышением точности. С другой стороны, начиная еще с работ [30] известно, что анизотропия эффективной массы может быть вполне успешно учтена, если в пробной волновой функции Φ выбрать в виде $\sqrt{a^2(\rho^2 + b^2z'^2)}$ с параметрами a и b в качестве вариационных. В результате мы приходим к целесообразности того, что пробная волновая функция основного состояния может быть смоделирована во всем диапазоне изменения r и \mathcal{B} с помощью $\Phi(r)$ следующего вида:

$$\Phi^2 = a^2(\rho^2 + b^2z'^2) + \sqrt{1 + \mathcal{B}^2(u\rho^2 + wz'^2)}\sqrt{z'^2 + v^2\rho^2} + \frac{\mathcal{B}^2\rho^4}{16}. \quad (2.6)$$

Обратим теперь внимание на симметричные свойства искомых решений уравнения

Шредингера. Группой симметрии гамильтониана эффективной массы является $D_{\infty d}^3$. По единичному представлению этой группы преобразуется функция (2.6) и, конечно же, волновая функция основного состояния.

Другие решения уравнения Шредингера будем искать в следующей форме:

$$\Psi_i = R_i e^{-\Phi_i}, \quad (2.7)$$

предполагая, что показатель экспоненты здесь имеет вид, аналогичный (2.6). Каждое i -е решение уравнения (2.7) определяется, естественно, своим набором a_i, b_i, u_i, \dots вариационных параметров функции Φ_i . Симметрия решения полностью определяется функцией $R_i(\mathbf{r})$. Кроме того, мы потребуем, чтобы функция R_i возрастала при больших r не быстрее чем по степенному закону. А именно, для произвольного фиксированного несимметричного направления, заданного углами θ и φ , должно быть

$$R_i|_{r \rightarrow \infty} \propto r^{N-1}, \quad N \geq 1, \quad (2.8)$$

где N — натуральное число, которое можно принять в качестве главного квантового числа состояния. Полный набор всех квантовых чисел, идентифицирующих решение уравнения Шредингера, описывается индексом i . Напомним, что нам уже известно азимутальное число m . Нетрудно показать, что из условия (2.8) следует ограничение $|m| \leq N - 1$.

Еще одной характеристикой состояния является представление, по которому преобразуется функция R_i . Вид этого представления, очевидно, никак не связан с N , но зависит, вообще говоря, от m . В частности, если $m \neq 0$, то представление, соответствующее R_i , не может быть единичным. Будем рассматривать только нижнюю часть спектра, т. е. состояния, энергия которых ниже нулевого уровня Ландау (во всяком случае при полях \mathcal{B} , меньших некоторой конечной величины) и которые при $\mathcal{B} \rightarrow 0$ и $\gamma \rightarrow 1$ переходят в состояния дискретной части кулоновского спектра. Таким образом, можно построить классификацию рассматриваемых решений (2.1), сохранив обозначения соответствующего кулоновского состояния. При этом буквенный индекс определяет представление, для которого R_i является базисной функцией. Индекс i основного состояния есть, очевидно, $1s$. Мы рассмотрим и другие решения уравнения Шредингера (2.1), для которых $i = 2s, 2p_m, 3p_m$ ($m = 0, \pm 1$), $3d_{\pm 1, \pm 2}$. С учетом сказанного выше выберем функции R_i в виде

$$R_{1s} = 1, \quad R_{2s} = Q_{2s}, \quad R_{2p_0} = z', \quad R_{2p_{\pm 1}} = \rho e^{\pm i\varphi}, \quad (2.9)$$

$$R_{3p_0} = z' Q_{3p_0}, \quad R_{3p_{\pm 1}} = \rho e^{\pm i\varphi} Q_{3p_{-1}}, \quad R_{3d_{\pm 1}} = z' \rho e^{\pm i\varphi}, \quad R_{3d_{\pm 2}} = \rho^2 e^{\pm 2i\varphi},$$

где

³⁾ В данном случае речь идет о магнитной группе, т. е. учтено, что аксиальный вектор \mathbf{B} , направленный вдоль оси C_{∞} , при поворотах u_2 и отражениях σ_d меняет знак. При остальных преобразованиях этой группы, включая отражение σ_h , вектор \mathbf{B} сохраняется. Если же рассматривать сразу уравнение Шредингера (2.1), то в него поле входит просто в качестве числового параметра \mathcal{B} , так что группой симметрии этого уравнения является $C_{\infty h}$. Заметим также, во избежание недоразумений, что решения уравнения Шредингера, зависящие от угла φ , являются базисными функциями представлений группы $C_{\infty h}$. Для того чтобы они оставались базисными функциями представлений магнитной группы $D_{\infty d}$, необходимо в $\exp(im\varphi)$ учесть явно зависимость от магнитного поля, сделав замену $\varphi \rightarrow \varphi \mathbf{n}_z \mathbf{B} / |\mathbf{B}|$, где \mathbf{n}_z — единичный вектор в положительном направлении оси z .

$$Q_i = 1 - c_i \sqrt{m_i^2 + \sqrt{z'^2 + d_i^2 \rho^2} + s_i^2 (\rho^2 + t_i^2 z'^2)}. \quad (2.10)$$

Пояснения, очевидно, требует только вид функций (2.10), определяющих предэкспоненту для состояний $2s$, $3p_0$, и $3p_{\pm 1}$. Действительно, условию (2.8) для состояния $2s$ можно удовлетворить и с помощью функции $1 - c\sqrt{z'^2 + d^2 \rho^2}$ в качестве R_{2s} , но при этом в области $r \lesssim 1$ (а именно в этой окрестности прежде всего и существенна предэкспоненциальная функция) мы ограничиваем рассмотрение только двумя главными членами нулевого и первого порядков по r для предэкспоненты пробной волновой функции. Оказывается, что учет следующего квадратичного по r члена заметно улучшает точность вариационного расчета. В то же время при простом добавлении такого члена в предэкспоненту нарушилось бы правило (2.8). В итоге выражение (2.10) представляет собой наиболее естественный вариант учета обоих требований. Случаю $\mathcal{B} = 0$, $\gamma = 1$ отвечают, например, следующие точные значения коэффициентов в (2.10): $d_i = t_i = m_i = 1$, $s_i = 1/2$, $c_{2s} = 1/2$, $c_{3p_0} = c_{3p_{-1}} = 1/4$. Обратим внимание на то, что разность безразмерных энергий в состояниях, различающихся лишь знаком квантового числа m , равна $2|m|$, соответственно волновые функции этих состояний имеют одинаковую зависимость от ρ и z' .

Как видно из формул (2.7), (2.9), (2.10), функции (Ψ_{1s}, Ψ_{2s}) , $(\Psi_{2p_0}, \Psi_{3p_0})$ и $(\Psi_{2p_{-1}}, \Psi_{3p_{-1}})$ попарно неортогональны. Ортогонализация соответствующих состояний происходит уже в процессе решения задачи. При этом общая схема расчета соответствует использованной в работах [15, 16, 43] и состоит в следующем. Припишем индекс 1 первому в рассматриваемой паре состояний, а индекс 2 — второму. Варьируя параметры a_1, b_1, \dots , мы прежде всего находим оптимальную волновую функцию Ψ_1 , для которой минимален функционал

$$\mathcal{E}(\Psi_1) = \frac{\langle \Psi_1 | \mathcal{H} | \Psi_1 \rangle}{\langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle}. \quad (2.11)$$

Здесь \mathcal{H} — безразмерный гамильтониан (оператор, действующий на Ψ в левой части уравнения (2.1)). Затем уже с известной функцией Ψ_1 переходим к другому базису

$$\begin{aligned} \Psi'_1 &= C_{11}\Psi_1 + C_{12}\Psi_2, \\ \Psi'_2 &= C_{21}\Psi_1 + C_{22}\Psi_2, \end{aligned} \quad (2.12)$$

причем коэффициенты C_{ij} должны определяться следующими двумя требованиями: 1) $\langle \Psi'_1 | \Psi'_2 \rangle = 0$; 2) величины $\mathcal{E}_i = \langle \Psi'_i | \mathcal{H} | \Psi'_i \rangle / \langle \Psi'_i | \Psi'_i \rangle$, при заданных Ψ_1 и Ψ_2 рассматриваемые как функции C_{ij} , должны быть минимальны.

В результате поиск C_{ij} представляет собой простейший случай использования метода Ритца (см. [44], а также Приложение в работе [43]) и сводится к определению корней $\mathcal{E}_{1,2}$ уравнения $\det|H - \mathcal{E}Y|$, где H и Y — матрицы с элементами $H_{ij} = \langle \Psi_i | \mathcal{H} | \Psi_j \rangle$, $Y_{ij} = \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$. Искомые коэффициенты находятся как собственные векторы $C_i = (C_{i1}, C_{i2})$, отвечающие нетривиальному решению линейной однородной системы $(H - \mathcal{E}_i Y)C_i = 0$. Наконец, больший из этих двух корней, а именно \mathcal{E}_2 , рассматривается как функционал на пространстве функций Ψ_2 . Варьируя параметры $a_2, b_2, \dots, c_2, m_2, \dots$, находим $\min(\mathcal{E}_2)$, что дает нам значение энергии в состоянии 2, а соответствующее значение корня \mathcal{E}_1 — энергию в состоянии 1. Последняя величина оказывается, таким образом, «подправленной» по сравнению с уже найденным на первом этапе решения значением (2.11). Нормированные функции $\Psi'_{1,2}$ в дальнейшем рассматриваются в качестве волновых функций собственных состояний. Для ортогональных состояний $3d_{-1,-2}$ вычисление, естественно, ограничивается первым этапом, т. е. минимизацией функционала (2.11).

Обратим внимание на очень существенный момент, позволяющий косвенным образом оценить ошибку расчета. Переход (2.12) от функций $\Psi_{1,2}$ к функциям $\Psi'_{1,2}$ формально нарушает условие (2.8) для состояния 1, если только коэффициент C_{12} не равен нулю. Связано это с тем, что найденная описанным выше методом функция Ψ_2 всегда содержит экспоненту $\exp(-\Phi_2)$, убывающую значительно медленнее, чем $\exp(-\Phi_1)$ ⁴⁾. Однако во всех расчетах оказывается, что коэффициент C_{12} для рассматриваемых пар состояний очень мал, так что поправка, определяемая им, в пределах нашей точности не сказывается вообще на энергии \mathcal{E}_1 . Следовательно, вид функции Ψ_1 выбран удачно. Иными словами, можно утверждать, что условие (2.8) выполняется для наших функций с точностью, соответствующей точности производимых расчетов. В то же время при расчете матричных элементов поправка, связанная с коэффициентом C_{12} , становится заметной. В частности, при вычислении квадрупольного момента $Q_{zz} = \langle i|2z^2 - \rho^2|i \rangle$ в состояниях $i = 1s, 2p_0, 2p_{-1}$ оказалось, что переход $\Psi_1 \rightarrow \Psi'_1$ несколько меняет значение Q_{zz} . Изменение, которое во всем диапазоне изменения \mathcal{B} было меньше 1%, характеризует точность, с которой мы в данном случае можем находить матричные элементы. В самом деле, строго говоря, при переходе к оптимальному базису (2.12) было бы правильнее рассматривать не пару (1, 2), а, например, тройку состояний (1, 2, 3), в которой состояние 3 имеет ту же симметрию, что и 1, 2 (для рассматриваемых пар функций третье состояние — это соответственно $3s, 4p_0$ и $4p_{-1}$). Поправка к Ψ_1 вида $C_{13}\Psi_3$ будет, вообще говоря, того же порядка, что и $C_{12}\Psi_2$, но нами не учитывается. Таким образом, разница в ответах, получаемых с помощью Ψ_1 и Ψ'_1 , позволяет оценить ошибку метода, причем учет члена $C_{12}\Psi_2$, определяющего смешивание, в расчетах, производимых с помощью волновой функции состояния 1, не обязателен, так как является превышением точности. Аналогичным образом, если правильно «угадан» вид функции Ψ_2 , то следует ожидать, что поправка к Ψ'_2 вида $C_{23}\Psi_3$ не скажется на ответах, во всяком случае в рамках той же самой ошибки метода.

Совсем иное дело — смешивание $C_{21}\Psi_1$ во второй строке (2.12). Его учет не нарушает условия (2.8), поэтому никаких оснований ожидать, что коэффициент C_{21} окажется мал, нет. Расчет показывает, что C_{21} для произвольных γ и \mathcal{B} того же порядка, что и C_{22} , и во всех вычислениях, использующих волновую функцию состояния 2, следует, конечно, пользоваться Ψ'_2 в виде (2.12).

Кроме этого существует еще целый ряд прямых и косвенных признаков того, что найденные в нашем методе волновые функции с вполне приемлемой точностью пригодны для расчета как диагональных, так и недиагональных матричных элементов дипольного и квадрупольного моментов. Укажем на некоторые из этих признаков. Прежде всего во всех расчетах оказывалось, что условие (2.8), накладываемое на асимптотику, всегда приводит к такой волновой функции, что уравнение $\Psi'_{1,2}(\mathbf{r}) = 0$ относительно r имеет $N - 1$ действительных корней при фиксированных углах θ и φ . Хотя мы не имеем строгого доказательства необходимости этого условия, оно кажется естественным и, очевидно, коррелирует с осцилляционной теоремой для одномерного уравнения Шредингера.

Важным косвенным признаком правильности выбора пробной волновой функции является то, что почти всегда для рассмотренного диапазона изменения поля \mathcal{B} вариационные параметры, определяющие оптимальную пробную функцию, оказываются

⁴⁾ Этот результат сам по себе является одним из косвенных подтверждений «правильности» найденных волновых функций в состояниях 1 и 2.

слабыми плавными функциями \mathcal{B} . Некоторые из них, например a_{1s} и b_{1s} , меняются настолько слабо, что их значения, соответствующие $\mathcal{B} = 0$, можно зафиксировать и считать постоянными вплоть до $\mathcal{B} \sim 10$ без сколько-нибудь существенной потери точности расчета. Для двумерной задачи исключение из общей картины составляет лишь параметр b для d -состояний в германии, который в оптимальной пробной волновой функции начинает при $\mathcal{B} > 0.5$ резко уменьшаться и падает фактически до нуля. Это, впрочем, не означает резкого изменения самой пробной функции, так как ее зависимость от z , начиная с этих полей, определяется параметром w , возросшем по сравнению с его значением в нулевом поле примерно на порядок. В принципе, в нашем методе допустимо существенное уменьшение числа вариационных параметров, но мы не делаем этого, во-первых, потому, что априори нельзя указать, какой набор варьируемых параметров из числа входящих в (2.9), (2.10) является наилучшим, во-вторых, наблюдение за изменением значений параметров, определяющих оптимальную пробную волновую функцию, в зависимости от величины \mathcal{B} является дополнительным способом контроля правильности расчета. В частности, для $\gamma = 1$ непосредственным образом проверялся выход на асимптотику (2.5).

Ряд прямых сравнений наших расчетов с ответами, полученными в ходе точных решений двумерной задачи [25–29, 32, 33], приведены в следующем разделе. Здесь мы продемонстрируем лишь один результат прямой проверки волновой функции основного состояния для случая, когда $\gamma = 1$, $\mathcal{B} = 0.1$. При этом квадрупольный момент Q_{zz} может быть найден по теории возмущений и с точностью до трех знаков (используется теория возмущений второго порядка, т. е. учитываются члены $\sim \mathcal{B}^4$) равен 0.0231. Результаты, которые получаются после вариационного расчета с пробными волновыми функциями различного вида, приведены в [21]; они дают разброс более чем на порядок для Q_{zz} от 0.2327 до 0.0127, причем в этом смысле «лучшая» из пробных функций в [21] соответствует $Q_{zz} = 0.0236$. В то же время вычисление $Q_{zz} = \langle 1s|2z^2 - \rho^2|1s\rangle / \langle 1s|1s\rangle$ с нашей функцией, найденной после минимизации функционала (2.11) (при этом $a_{1s} = 0.9990$, $b_{1s} = 1.0002$, $u_{1s} = 1.065 \cdot 10^{-3}$, $v_{1s} = 3.129$, $w_{1s} = 1.291 \cdot 10^{-3}$), с точностью до всех трех значащих цифр приводит к величине, совпадающей с ответом, полученным по теории возмущений.

2.2. Магнитное поле \mathbf{B} перпендикулярно оси вращения эллипсоида эффективной массы (трехмерная задача)

Пусть магнитное поле направлено по-прежнему вдоль z , а главная ось эллипсоида эффективной массы вдоль оси y . Группой симметрии гамильтониана с учетом изменения вектора \mathbf{B} при пространственных преобразованиях будет группа D_{2h} . После приведения к безразмерному виду согласно (2.2) и подстановки $\mathcal{B} = \mathcal{B}' / \sqrt{\gamma}$, $y = y' \sqrt{\gamma}$ получим уравнения Шредингера в виде

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y'^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + i\mathcal{B}' \left(y' \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y'} \right) + \frac{1}{4} \mathcal{B}'^2 (x^2 + y'^2) - \frac{2}{\sqrt{\gamma y'^2 + x^2 + z^2}} \right] \Psi = \mathcal{E} \Psi. \quad (2.13)$$

Правила, которыми мы будем руководствоваться при выборе пробной волновой функции, остаются по существу теми же, что и для двумерной задачи. Представим эти функции в виде (2.7), причем Φ_i и R_i должны удовлетворять условиям (2.3) и (2.8), но теперь

$\rho = \sqrt{x^2 + y'^2}$, $r = \sqrt{\rho^2 + z^2}$. В результате естественным образом обобщаются формулы (2.9), (2.10). Мы рассмотрим шесть состояний, для которых

$$\Phi_i^2 = a_i^2(z^2 + x^2 + b_i^2 y'^2) + \sqrt{1 + \mathcal{B}'^2}(u_i x^2 + k_i y'^2 + w_i z^2) \sqrt{z^2 + v_i^2(x^2 + t_i^2 y'^2)} + \mathcal{B}'^2(x^2 + y'^2)^2/16, \quad (2.14)$$

$$R_{1s} = 1, \quad R_{2s} = Q_{2s}, \quad R_{2p_0} = hx - iy', \quad R_{2p_+} = x + igy', \quad (2.15)$$

$$R_{2p_-} = z, \quad R_{3p_-} = zQ_{3p_-},$$

$$Q_i = 1 - c_i \sqrt{m_i^2 + \sqrt{z^2 + (l_i x)^2 + (d_i y')^2} + s_i^2 [z^2 + n_i^2(x^2 + q_i^2 y'^2)]}. \quad (2.16)$$

Обратим внимание на то, что мы здесь сохранили те же обозначения, что и в работах [10–13], т. е. индексы соответствуют индексам аксиально-симметричных состояний в нулевом поле. Если перейти к аксиально-симметричной задаче, убирая анизотропию ($\gamma \rightarrow 1$), то неортогональные состояния (2.14)–(2.16), $2p_0$ и $2p_+$, переходят в состояния $2p_{-1}$ и $2p_{+1}$ атома водорода в магнитном поле (при этом $g = h = 1$), а состояния $2p_-$ и $3p_-$ — соответственно в $2p_0$ и $3p_0$. При $\mathcal{B}' \rightarrow 0$ состояния, описываемые функциями $\Psi_{2p_{\pm}}$, должны, каждое независимо, переходить в двукратно вырожденное состояние $2p_{\pm 1}$ двумерной задачи в нулевом поле (причем в результате решения вариационной задачи должно быть $g \rightarrow 0$).

Ортогонализация пар (Ψ_{1s}, Ψ_{2s}) , $(\Psi_{2p_0}, \Psi_{2p_+})$ и $(\Psi_{2p_-}, \Psi_{3p_-})$ в трехмерной задаче проводится по той же схеме, что была описана выше. Для состояний $(1s, 2s)$ и $(2p_-, 3p_-)$ коэффициент смешивания C_{12} в (2.12) оказывается по-прежнему малым (порядка 10^{-4} – 10^{-3} от C_{11}) и не сказывается на энергии состояния. Сравнение значений квадрупольного момента, вычисленных с помощью функций Ψ_{1s} и Ψ'_{1s} или Ψ_{2p_-} и Ψ'_{2p_-} , дает возможность, как и в случае двумерной задачи, оценить ошибку в расчетах матричных элементов. Эти оценки показывают, что в трехмерном случае найденные волновые функции позволяют получать ответы для дипольного и квадрупольного моментов по крайней мере с точностью не хуже 10%. В то же время для состояний $2p_0$ и $2p_+$ ортогонализация (2.12) не нарушает условия (2.8), поэтому никаких оснований ожидать, что коэффициент C_{12} будет в этом случае мал, нет. Расчет, однако, показывает, что величина $|C_{12}|$ составляет не более чем несколько процентов от $|C_{11}|$, а соответствующая поправка к энергии \mathcal{E}_1 — порядка одной десятой процента.

3. ДОНОРНЫЕ УРОВНИ ДЛЯ ДОЛИН, ОРИЕНТИРОВАННЫХ ПО ПОЛЮ В

Случай, который мы рассмотрим в этом разделе, реализуется в германии, если $\mathbf{B} \parallel \langle 111 \rangle$, и кремнии, если $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$. Речь пойдет об эллипсоидах поверхности постоянной энергии, которые по терминологии работ [13, 15, 16] относятся к случаю А. С учетом многодолинности соответствующие состояния в германии не вырождены, а в кремнии вырождены двукратно. В магнитном поле уровни энергии этих состояний находятся выше, чем уровни триплета в Ge (три эллипсоида так называемого типа В [13, 15, 16], ориентированные под углом $70^\circ 32'$ к направлению \mathbf{B}) и квадруплета в Si (четыре долины типа Е, см. следующий раздел).

В этой работе мы не выходим за рамки приближения эффективной массы и поэтому будем полностью пренебрегать химическим сдвигом уровней и их долин-орбитальным

расщеплением, которое возникает при учете потенциала центральной ячейки (см., например, [45, 33]), т.е. короткодействующей составляющей (как правило, совершенно неизвестной) поля примесного иона. Фактически междолинные эффекты оказываются существенными только для состояния $1s$, уровень энергии E_{1s} которого не пересекается с уровнями энергии других состояний той же долины. Это, во всяком случае, означает, что состояние $1s$ никогда не принимает участия в исследуемом резонансе, так что значение $\mathcal{E}_{1s}(\mathcal{B})$ и соответствующая волновая функция для нас не важны. В то же время тип междолинного расщепления для примеси замещения (каковой обычно и является мелкий донор) качественно может быть легко описан на основе теоретико-группового анализа аналогично тому, как это делается при $\mathbf{B} = 0$ [45]. Пример такого анализа дан в Приложении 1 применительно к S -состояниям для тех направлений магнитного поля, которые рассматриваются в этой работе. Некоторая особенность состоит лишь в том, что точечная группа направлений для кристалла со встроенным магнитным полем описывается теперь соответствующим магнитным классом.

Следует отметить, что количественный расчет волновых функций с учетом центрально-ячеечной поправки наиболее последовательно выполнен в [33] для случая $\mathbf{B} = 0$. Более примитивно, но уже с учетом конечного поля \mathbf{B} рассчитано долин-орбитальное расщепление для кристалла Ge, при этом расщепление уровня $2s$ уже в нулевом поле оказалось существенно завышено по сравнению с экспериментом (см. об этом в [13]). Кроме того, в [15] для случая $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$ допущена явная ошибка, приведшая к качественно неверному характеру расщепления квадруплета (см. Приложение 1).

Прежде всего продемонстрируем результаты, относящиеся к нулевому полю, и сравним их с точным расчетом в рамках приближения эффективной массы [33] и расчетами работ [31, 32]. Все результаты сведены в табл. 1. Заметим в связи с этим, что метод использованный в [32], хотя и называется вариационным, но представляет собой по существу метод Ритца, в котором варьируемыми параметрами являются коэффициенты разложения искомой радиальной волновой функции по фиксированной системе простых базисных функций. Если размерность такого базиса ничем не ограничена, то ответ может быть получен со сколь угодно большой точностью. При расчете энергии четных состояний в работе [32] число базисных функций доходило до 105. Иными словами, этот вариационный метод включает 105 подгоночных параметров. Ясно, что использовать в последующих расчетах волновую функцию, полученную в таком виде, крайне неудобно.

В табл. 1 не приводятся для сравнения какие-либо экспериментальные данные. В нулевом магнитном поле такие измерения для распространенных полупроводниковых материалов были выполнены достаточно давно (см., например, обзор [46], а также работу [47]), и их анализ подробно проделан в [32, 33, 41]. В результате можно констатировать, что расчет уровней в рамках приближения эффективной массы с ошибкой меньшей, чем погрешность спектроскопических измерений, совпадает с экспериментальными значениями для всех возбужденных состояний, кроме состояний $2s$, $3s$ и $3d_0$, но и для последних химический сдвиг составляет не более чем несколько процентов от величины энергии. Более важным для нас является сравнение матричных элементов, найденных с помощью наших волновых функций и «точных» волновых функций. В работе [33] рассчитаны силы осцилляторов оптических переходов в P -состояния из основного состояния $1s$. Значения соответствующих им безразмерных величин

$$\frac{\gamma |\mathcal{E}_{Np_0} - \mathcal{E}_{1s}|}{2 + \gamma} \langle 1s | z' | Np_0 \rangle^2 \quad \text{и} \quad \frac{|\mathcal{E}_{Np_{\pm 1}} - \mathcal{E}_{1s}|}{2 + \gamma} \langle 1s | \rho e^{\mp i\varphi} | Np_{\pm 1} \rangle^2, \quad (3.1)$$

Таблица 1

Случай нулевого магнитного поля

	Состояние	Энергия связи, мэВ				Сила осциллятора (3.1), 10^{-3}		
		i	Наш расчет	[33]	[32]	[31]	Наш расчет	[33]
Ge		$ E_i = 4.676 \mathcal{E}_i $ [мэВ]						
	1s	9.78 (9.73)	9.78	—	9.78	—	—	
	2p ₀	4.75 (4.71)	4.75	4.78	4.74	17.9	18.8	
	2s	3.58 (3.49)	—	3.60	3.52	—	—	
	3p ₀	2.57 (2.54)	2.57	2.59	2.56	2.29	1.91	
	2p _{±1}	1.72 (1.72)	1.72	1.73	1.73	233	233	
	3d _{±1}	1.26	—	1.27	—	—	—	
	3p _{±1}	1.04	1.04	1.04	1.03	42.5	40.6	
	3d _{±2}	0.674	—	0.68	—	—	—	
Si		$ E_i = 19.94 \mathcal{E}_i $ [мэВ]						
	1s	31.25	31.27	—	31.27	—	—	
	2p ₀	11.48	11.49	11.49	11.51	56.1	57.9	
	2s	8.85	—	8.86	8.83	—	—	
	2p _{±1}	6.40	6.40	6.40	6.40	289	287	
	3p ₀	5.48	5.485	5.49	5.48	8.43	7.81	
	3d _{±1}	3.87	—	3.87	—	—	—	
	3p _{±1}	3.12	3.12	3.12	3.12	55.0	53.9	
	3d _{±2}	2.63	—	2.63	—	—	—	

Примечание. Сравняется наш расчет энергий E_i состояний нижней части спектра мелких доноров в Ge и Si с расчетами [31–33], выполненными в рамках приближения эффективной массы. В круглых скобках приведены значения, найденные в [15, 16] для случая $\mathbf{B} = 0$. Для P -состояний вычислены силы осцилляторов (3.1) оптических переходов $Np_m \rightarrow 1s$. Соответствующая безразмерная величина (3.1) приведена в предпоследнем столбце; в последнем столбце — эта же величина, найденная в результате точного расчета [33].

найденные в [33] (в приближении эффективной массы) и рассчитанные нами, также приведены в табл. 1. Угловые скобки в (3.1) означают усреднение в безразмерном базисе x, y, z (но не x, y, z' !). Предполагается, что состояния нормированы в этом же базисе. Видно, что согласие с точным расчетом с учетом указанных выше определенных особенностей вариационного метода является вполне удовлетворительным. Заметим, что расчет матричных элементов дает всегда примерно одну и ту же абсолютную погрешность, определяемую точностью найденных волновых функций. При этом относительная ошибка возрастает, если рассчитываемая величина в наших безразмерных единицах мала.

На рис. 1 и 2 представлены расчеты спектров отсчитанной от нулевого уровня Ландау энергии возбужденных состояний доноров соответственно в германии и кремнии. Пересечение уровней $2s$ и $2p_{-1}$ при B равном 9.9 Тл в Ge и 10.5 Тл в Si выделено рамкой. Обратим внимание на инверсию уровней состояний $2p_{-1}$ и $3p_0$ в слабых полях (пример-

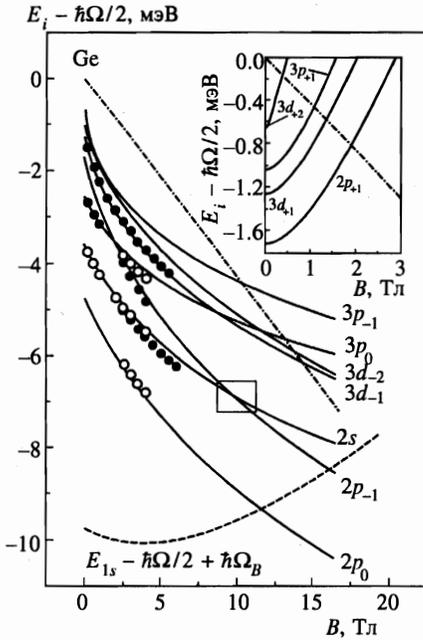


Рис. 1

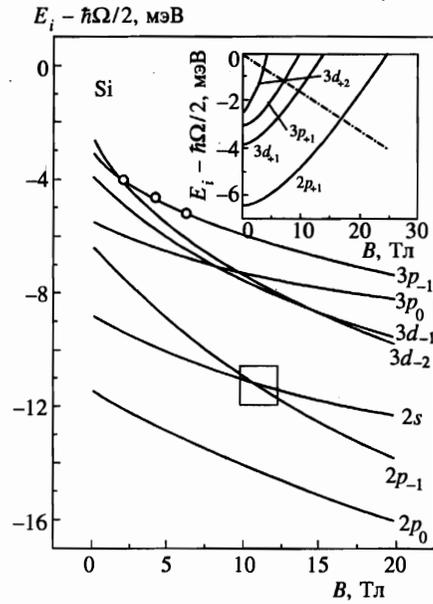


Рис. 2

Рис. 1. Уровни энергии мелких доноров в германии в поле $B \parallel \langle 111 \rangle$ для долины A -типа с осью вращения, параллельной B . Энергия отсчитана от нулевого уровня Ландау этой же долины. На вставке приведены энергии в состояниях с положительным квантовым числом m (они рассчитываются сложением энергии уровня с $m < 0$ и величины $|m|\hbar\Omega$). Край зоны проводимости (нулевой уровень Ландау трех других долин B -типа), отсчитанный от нулевого уровня A -долины, показан штрихпунктирной линией в основной части и на вставке, ему соответствует энергия $\hbar(\Omega_B - \Omega)/2$, где $\Omega_B = \Omega\sqrt{1+8\gamma}/3 \approx 0.396\Omega$. Штриховая кривая — энергия состояния $1s$, смещенная вверх на величину циклотронной энергии электронов проводимости. Точки ее пересечения со сплошными кривыми определяют (в рамках приближения эффективной массы) положения главных пиков неупругого магнитопримесного резонанса. Точки — экспериментальные данные [13], привязка к уровням $2p_{-1}$ (o) и $2p_0$ (•)

Рис. 2. Уровни энергии мелких доноров в кремнии в поле $B \parallel \langle 001 \rangle$ для долин A -типа. Используются те же обозначения, что и на рис. 1. Край зоны проводимости (штрихпунктирная линия) определяется E -долинами, ориентированными вдоль $\langle \pm 100 \rangle$ и $\langle 0 \pm 10 \rangle$. На рисунке ему соответствует энергия $\hbar(\Omega_E - \Omega)/2$, где $\Omega_E = \Omega\sqrt{\gamma} \approx 0.456\Omega$. Точки — эксперимент [10], привязка к уровню $2p_{-1}$

но до 2 Тл) в кристалле Ge. На рис. 1 отмечены данные измерений линий поглощения по фотопроводимости в Ge(Sb) [13]. Особенность здесь состоит в том, что в эксперименте всегда измерялась энергия перехода между двумя состояниями, поэтому зависимость энергии от B одного из уровней спектра должна быть привязана к теоретической. Мы использовали привязку как к уровню $2p_0$ (черные кружки), так и к уровню $2p_{-1}$ (светлые кружки). В результате видно, что для определения энергии состояния $2s$ привязка к уровню $2p_{-1}$ выглядит предпочтительнее. Взаимное положение уровней $2p_0$ и $2p_{-1}$

определялось сложением зеемановских компонент переходов $2p_0 \rightarrow 2s$ и $2s \rightarrow 2p_{-1}$. Так же, только с участием состояния $2s$, из данных измерений [13] может быть определен уровень $3p_0$ в полях выше 2.5 Тл (переходы $2s \rightarrow 2p_{-1}$ и $2s \rightarrow 3p_0$), и только ниже 1 Тл этот уровень рассчитывается с помощью разности компонент $2p_0 \rightarrow 3d_{-1}$ и $3p_0 \rightarrow 3d_{-1}$. В то же время состояние $2s$ сильнее, чем другие возбужденные состояния, подвержено влиянию эффектов, выходящих за рамки приближения эффективной массы, прежде всего таких как химический сдвиг и долин-орбитальное расщепление, а также уширение, обусловленное несовпадением положения примесного центра с положением узла решетки. В результате сумма или разность измеряемых компонент будет эффективно отличаться от действительной разности энергий $|E_{2p_{-1}} - E_{2p_0}|$ и $|E_{3p_0} - E_{2p_{-1}}|$. Эффект должен усиливаться с ростом B (что действительно и наблюдается, см. рис. 1), так как с «сжатием» волновой функции роль центральной ячейки в формировании эффективного потенциала возрастает и он все более отличается от кулоновского. По нашему мнению, в этом (а не в ошибке расчета) состоит причина расхождения с теорией именно для той части экспериментального спектра, которая определялась с использованием уровня $2s$.

Эксперименты в кремнии всегда проводятся, естественно, при значительно меньших безразмерных полях \mathcal{B} . Так, в работах [10–12] по измерению спектра фотовозбуждения $1s(A_1) \rightarrow Np_{\pm 1}$ (A_1 — единичное представление нижнего расщепленного дублета, см. рис. 7 в Приложении 1) в Si(P) максимальное значение \mathcal{B} составляло $\simeq 0.1$ [10] и $\simeq 0.15$ [11, 12]. Тем не менее расчет по теории возмущений из-за анизотропии эффективной массы оказывается малопригодным даже для определения энергии состояний (см. [14]), не говоря уже о волновых функциях. Использование вариационного метода Ритца в базисе собственных функций кулоновских состояний позволяет улучшить согласие расчета с опытом (см. [11]), но понимание представленных графически в [11, 12] результатов эксперимента наталкивается на определенную трудность. Дело в том, что в этих измерениях для эллипсоидов эффективной массы типа A разности уровней $\Delta_{2p} = E_{2p_{+1}} - E_{2p_{-1}}$, $\Delta_{3p} = E_{3p_{+1}} - E_{3p_{-1}}$ и $\Delta_{4p} = E_{4p_{+1}} - E_{4p_{-1}}$ существенно (с ошибкой, много большей чем обычная ошибка спектроскопических измерений) не равны друг другу и величине

$$\hbar\Omega = \hbar eB/m_{\perp}c.$$

Мы не видим этому каких-либо разумных объяснений, поэтому на рис. 2 отметили только данные эксперимента [10] для $B = 2, 4$ и 6 Тл, к сожалению, тоже представленные лишь графически, но для которых с точностью, вполне согласующейся с ошибкой измерения, равенство $\Delta_{2p}(B) = \Delta_{3p}(B) = \hbar\Omega(B)$ выполнено. На основании данных [10] для эллипсоида A можно, привязываясь к уровню $E_{2p_{-1}}$, найти только энергию $E_{3p_{-1}}$.

Полезно провести сравнение наших результатов с соответствующими значениями, рассчитанными в [15, 16] методом, отличающимся от нашего лишь выбором пробной волновой функции. Отчасти (при нулевом поле) оно продемонстрировано в табл. 1. При других значениях B наш расчет дает величины $\mathcal{B} - \mathcal{E}_i$, большие чем в [15, 16] примерно на 1% или даже менее того. Такое различие на графиках рис. 1 было бы незаметным. Напомним, что важным является не это не слишком значительное уточнение энергии связи, а возможность с помощью наших волновых функций вычислять матричные элементы, чего волновые функции, использованные в [15, 16], сделать, конечно, не позволяют.

Мы не приводим здесь конкретные величины получаемых в результате расчета параметров a_i, b_i, \dots , полагая, что, пользуясь современными библиотечными программа-

ми, можно сравнительно легко повторить вычисления. Сделаем лишь одно замечание. Из-за анизотропии параметр u_i в оптимальной пробной волновой функции в слабых полях оказывается отрицательным, эффект выражен сильнее для Ge и отсутствует совсем, если $\gamma = 1$. В то же время при расчете $\langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle$ и $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$ «обрезание» бесконечности при численном интегрировании по ρ и z (предел интегрирования определяется требуемой точностью) всегда происходит внутри области пространства, где показатель экспоненты Φ_i есть монотонно возрастающая функция как ρ , так и z . Это возможно из-за того, что по модулю параметр u_i всегда достаточно мал. Например, $u = -4.38 \cdot 10^{-2}$ в поле $B = 0$ для германия для состояния $1s$, при этом $a = 1.61$, $b = 0.549$, $w = 0.126$, $v = 2.74$. Из всех отрицательных значений u_i мы здесь привели наибольшее по модулю. С ростом B оптимальное значение u_i увеличивается, проходит через нуль примерно в диапазоне $\mathcal{B} = 0.1-0.7$ и продолжает далее монотонно расти, оставаясь положительным. Это поведение характерно для всех рассчитанных состояний для обоих полупроводников; исключением является лишь состояние $3p_{-1}$ в том смысле, что для него значение u и для Ge, и для Si положительно с самого начала.

Таблица 2

Случай $\gamma = 1$

\mathcal{B}	1s			$2p_{-1}$		
	$\mathcal{B} - \mathcal{E}_{1s}$	$\langle 1s r^2 1s \rangle$	$\pi \Psi_{1s}(0) ^2$	$\mathcal{B} - \mathcal{E}_{2p_{-1}}$	$\langle 2p_{-1} r^2 2p_{-1} \rangle$	$ \langle 1s r 2p_{-1} \rangle ^2$
2	2.044	1.27	2.07	1.198	3.07	0.326
	2.044 [25, 26]	1.27 [25]	2.07 [25]	1.199 [25, 26]	3.07 [25]	0.325 [27]
	1.965 [19]	1.46 [19]	2.01 [19]	1.114 [19]	4.16 [19]	
20	4.413	0.324	15.2	2.894	0.577	0.0452
	4.431 [25, 26]	0.322 [25]	15.1 [25]	2.931 [25, 26]	0.598 [25]	0.0452 [27]
	4.097 [19]	0.507 [19]	15.6 [19]	2.638 [19]	1.05 [19]	

Примечание. Наш расчет (верхнее число в каждой колонке) сравнивается с точным решением уравнения Шредингера [25–27] и вариационным расчетом [19] (рядом с приводимыми числами указаны ссылки). Во избежание недоразумения заметим, что наше значение \mathcal{B} в два раза больше соответствующего безразмерного поля в таблицах работ [25–27].

В заключение этого раздела проведем сравнение результатов нашего расчета при $\gamma = 1$ в поле \mathcal{B} равном 2 и 20 с соответствующими точными ответами, полученными в работах [25–27], а также с результатами вариационного метода [19]. Мы демонстрируем это сравнение для состояний $1s$ и $2p_{-1}$. В табл. 2 приведены значения энергии \mathcal{E}_i , а также величин $\langle i | r^2 | i \rangle$, $\pi |\Psi_{1s}(0)|^2$ и силы диполя $|\langle 2p_{-1} | \rho e^{-i\varphi} | 1s \rangle|^2 / 2$ для перехода $1s \rightarrow 2p_{-1}$. Видно, что наши результаты весьма близки к точным, что подтверждает достоверность волновых функций, получаемых нашим методом.

Точные ответы для энергии состояний, найденные в работах [28, 29], в рамках интересующего нас приближения практически всегда совпадают с ответами в [25–27], так что сравнение с [28, 29] было бы излишним.

Интересно, что в случае, когда $\gamma = 1$, энергия связи состояния $2s$, а также других «вышележащих» состояний той же симметрии является немонотонной функцией поля \mathcal{B} [25–29]. Например, $\mathcal{B} - \mathcal{E}_{2s}$ имеет слабо выраженные максимум и минимум соответственно при $\mathcal{B} \simeq 0.15$ и $\mathcal{B} \simeq 0.3$. Наш расчет подтверждает это и в данном

случае с точностью по крайней мере до четырех значащих цифр совпадает с данными работ [25–29]. В то же время при $\gamma = 0.208$ и $\gamma = 0.05134$ в исследованном диапазоне безразмерных полей никакого немонотонного поведения уровней состояний $2s$ в двумерной задаче не обнаруживается. Как показывает непосредственный расчет, при отклонении γ от единицы немонотонность энергии связи для состояния $2s$ сглаживается и быстро исчезает.

4. УРОВНИ ДЛЯ ДОЛИНЫ, ОРИЕНТИРОВАННОЙ ПЕРПЕНДИКУЛЯРНО МАГНИТНОМУ ПОЛЮ (ТРЕХМЕРНАЯ ЗАДАЧА)

Результат расчета донорных состояний для ориентации E -типа приведен на рис. 3 и 4. Заметим, что соответствующие уровни энергии расположены ниже, чем при ориентации A -типа, так что, в частности, состояние $1s^{(E)}$ (см. ниже рис. 5) есть главное основное состояние донора в кремнии при $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$ и в Ge при $\mathbf{B} \parallel \langle 110 \rangle$. Особенностью трехмерной задачи является появление характерной немонотонности энергии связи вторых состояний в парах $(1s, 2s)$, $(2p_-, 3p_-)$ и $(2p_0, 3p_0)$, которая в определенном смысле имеет сходное происхождение с немонотонностью, упомянутой в конце предыдущего раздела.

Рассмотрим, например, состояние $2s$. При малых \mathcal{B} энергия связи имеет, очевидно, положительный линейный по полю сдвиг из-за смещения нулевого уровня Ландау, а также «диамагнитный» квадратичный сдвиг. Тот факт, что квадратичный сдвиг на-

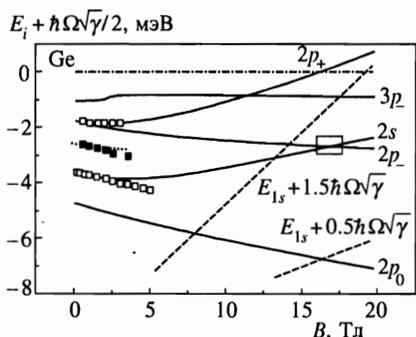


Рис. 3

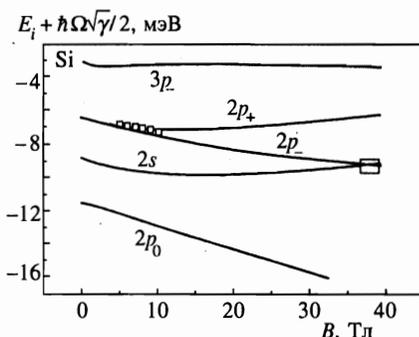


Рис. 4

Рис. 3. Уровни энергии мелких доноров в германии в поле $\mathbf{B} \parallel \langle 110 \rangle$ для долин E -типа, ориентированных вдоль $\langle -111 \rangle$ и $\langle 1-11 \rangle$. Энергия отсчитана от края зоны проводимости (нулевого уровня Ландау $\hbar\Omega_E/2 = \hbar\Omega\sqrt{\gamma}/2$, отмеченного штрихпунктирной горизонтальной прямой). Штриховые линии — энергия состояния $1s$, смещенная на $\hbar\Omega_E$ и $2\hbar\Omega_E$. Точки их пересечения со сплошными кривыми определяют (в рамках приближения эффективной массы) положения главного и второго пиков неупругого магнитопримесного резонанса. Точки — экспериментальные данные [13], привязка к уровням $2p_{-1}$ (\square) и $2p_0$ (\blacksquare). Пунктирная кривая — условно (см. текст) рассчитанная энергия состояния $3p_0$

Рис. 4. Уровни энергии мелких доноров в кремнии, отсчитанной от края зоны проводимости, в поле $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$ для четырех долин E -типа, ориентированных вдоль $\langle \pm 100 \rangle$ и $\langle 0 \pm 10 \rangle$. Точки — экспериментальные данные [11, 12], привязка к уровню $2p_-$

правлен в сторону уменьшения энергии связи, определяется общим обстоятельством: появление поля \mathbf{B} в системе понижает симметрию гамильтониана и уравнения Шредингера (2.13). Мы видели в предыдущем разделе, что если значение γ достаточно сильно отличается от единицы, немонотонность отсутствует. Действительно, в двумерной задаче поле \mathbf{B} не меняет симметрию уравнения Шредингера и квадратичный сдвиг при малом \mathcal{B} оказывается не столь существенным. При больших значениях \mathcal{B} задача становится близкой к двумерной, так как роль «деформированного» кулоновского потенциала в уравнении Шредингера (2.13) уменьшается по сравнению с членом $\mathcal{B}'^2(x^2+y^2)/4$. Решение с ростом \mathcal{B} должно приближаться к решению для атома водорода в перенормированном магнитном поле \mathcal{B}' . Энергия связи при этом, как известно, медленно (логарифмически) растет. Тем не менее минимум энергии связи для состояния $2s$ достигается в германии и кремнии при физически недостижимых полях и находится за пределами рис. 3 и 4. Напротив, для состояния $3p_-$ оба экстремума попадают в физически актуальную область.

Особый подход в трехмерном случае необходим при расчете волновой функции и энергии состояния $2p_+$ (см. (2.14), (2.15)]. Это состояние является «верхним» в паре с $2p_0$. Кроме того, ту же симметрию имеет состояние, которое естественно обозначить индексом $3p_0$ и которое должно строиться с помощью пробной волновой функции, имеющей предэкспоненту вида $(h'x - iy')Q_{3p_0}$ с множителем Q (2.16). Оно переходит в двумерное состояние $3p_0$ при $\mathcal{B} = 0$ ($h' = 0$) или двумерное состояние $3p_{-1}$, если $\gamma = 1$ (тогда $h' = 1$). В последнем случае уровни $2p_{+1}$ и $3p_{-1}$ пересекаются при $\mathcal{B} \simeq 0.13$ [27, 29]. С отклонением γ от единицы кроссинг переходит в антикроссинг, а состояния — соответственно в верхнегибридное и нижнегибридное. Область антикроссинга, с одной стороны, имеет тенденцию к сдвигу вправо по \mathcal{B} , так как уменьшается циклотронная энергия (в безразмерных единицах она есть $2\mathcal{B}' = 2\mathcal{B}\sqrt{\gamma}$) и поэтому понижается уровень $2p_+$. Но с другой стороны, уменьшение γ приводит к тому, что энергия \mathcal{E}_{3p_0} при малых \mathcal{B} (слева от области антикроссинга) сближается с \mathcal{E}_{2p_+} , а затем и опускается ниже уровня $2p_+$ теперь уже во всем диапазоне поля \mathcal{B} . Этот эффект инверсии имеет место в германии (см. рис. 1). Фактически же для кремния область антикроссинга, как показывает наш расчет, смещается в сторону больших полей (примерно в окрестность $\mathcal{B} \simeq 1.2$), так что в актуальном для нас диапазоне нижнегибридное состояние — это в основном состояние $2p_+$. Затем уменьшение γ приводит к быстрому смещению области антикроссинга влево до нуля, и уже в Ge кроссинг отсутствует совсем, а гибридизация состояний $2p_+$ и $3p_0$ должна быть мала.

Если рассматривать сразу не пару, а тройку состояний ($2p_0$, $2p_+$, $3p_0$), то метод Ритца позволяет, в принципе, найти оба гибридных состояния. Используя буквально метод, описанный во втором разделе, мы определим только нижнегибридное состояние, поэтому при расчете состояния $2p_+$ в Ge этот метод должен быть скорректирован. Чтобы «перескочить» через состояние $3p_0$, не рассчитывая его, и сразу вычислять состояние $2p_+$ в двумерном базисе функций (2.14)–(2.16), мы откажемся от варьирования параметра g , полагая, что $g = h$. Параметр h определяется на первом этапе решения вариационной задачи, причем расчет подтверждает, что $h \rightarrow 0$ при $\mathcal{B} \rightarrow 0$ и $h \rightarrow 1$ при $\mathcal{B} \rightarrow \infty$. В результате состояние $2p_+$ тоже автоматически имеет правильные асимптотики волновой функции. Именно таким способом получены наши ответы, описывающие это состояние в Ge.

Для кремния в соответствии с изложенным выше можно действовать аналогично разд. 2. Найденное состояние $2p_+$ в Si есть по существу нижнегибридное состояние вда-

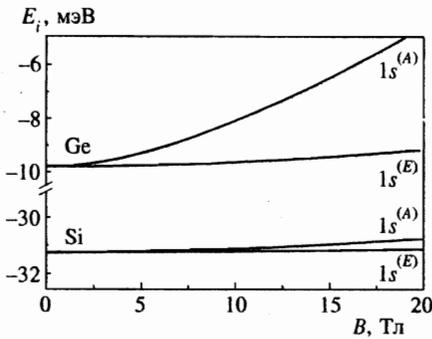


Рис. 5. Уровни энергии основного состояния, рассчитанного в приближении эффективной массы для долин A и E в германии и кремнии. Энергии отсчитаны во всех случаях от края зоны проводимости соответствующего полупроводника в нулевом магнитном поле

ли от области антикроссинга. Буквально применяя такую же процедуру расчета в случае, когда $\gamma = 0.05134$, получим энергию, близкую к правильной \mathcal{E}_{3p_0} в Ge при малых \mathcal{B} . Однако точность определения волновой функции без учета должной классификации решения по главному квантовому числу (2.8) будет в этом случае малопримемлой. Заведомо неправильное, без учета квадратичных членов, асимптотическое поведение предэкспоненты приведет к большим ошибкам при вычислении матричных элементов, а также и при расчете энергии для больших \mathcal{B} . Тем не менее на рис. 3 пунктирной линией изображен найденный таким образом уровень $3p_0$, причем при $\mathcal{B} \rightarrow 0$ наш ответ с точностью до трех знаков переходит в соответствующий результат двумерной задачи в предыдущем разделе.

На рис. 3 отмечены также экспериментальные значения энергии в состояниях $2s$ и $2p_+$, полученные из измерений зеемановских компонент переходов $2s \rightarrow 2p_-$ и $2s \rightarrow 2p_+$ [13] с привязкой к энергии состояния $2p_-$. Заметное расхождение с экспериментом для состояния $2s$ в Ge может объясняться по сути теми же причинами, о которых говорилось в предыдущем разделе. Черными квадратами на этом рисунке показаны экспериментальные данные положения уровня $3p_0$, найденные вычитанием энергий переходов $2p_0 \rightarrow 3d_{+1}$ и $3p_0 \rightarrow 3d_{+1}$ (см. [13]) с привязкой, естественно, к уровню $2p_0$. Интересно, что в работе [10] расщепление линии $2p_{\pm}$ в Si для E -ориентации вообще не наблюдалось вплоть до полей 6 Тл. Наш расчет показывает, что такое расщепление должно быть в условиях современного эксперимента заметным, начиная по крайней мере с полей 4 Тл, что и соответствует измерениям [11, 12]. На рис. 4 отмечены значения энергии в состоянии $2p_+$ для $B = 5-10$ Тл, которые можно получить из графиков, представленных в [11, 12] с привязкой к уровню $2p_-$.

Мы не приводим подробно результаты расчета энергии в основном состоянии $1s$, так как соответствующие ответы, найденные в приближении эффективной массы, как указывалось, слишком далеки от действительности. Однако, оставаясь в рамках этого приближения, интересно проследить, насколько энергия E_{1s} зависит от ориентации поля. Сравнение энергий в состояниях $1s^{(A)}$ и $1s^{(E)}$ продемонстрировано на рис. 5. Как и в предыдущем разделе, рамками на рис. 3 и 4 отмечены точки упругого магнитоупругого резонанса.

5. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА ПРОВОДИМОСТИ НА ВОЗБУЖДЕННОМ НЕЙТРАЛЬНОМ ДОНОРЕ И УПРУГИЙ МАГНИТОПРИМЕСНЫЙ РЕЗОНАНС

Задача о рассеянии, в принципе, может рассматриваться для носителей обоих видов, но время жизни свободных дырок в полупроводниках n -типа слишком мало. Главным эффектом инжектирования дырок в нашу систему было бы понижение уровня Ферми и ионизация доноров, что, естественно, исключает возможность наблюдения рассматриваемого резонанса.

Заметим также, что, поскольку речь идет о температурах $T \lesssim 10$ К и полях $B \gtrsim 10$ Тл, в качестве свободных носителей будем подразумевать электроны нулевой зоны Ландау, причем относящиеся к долинам с наименьшей по сравнению с другими циклотронной частотой. Для кремния при $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$ — это электроны квадруплета $\langle \pm 100 \rangle$ и $\langle 0 \pm 10 \rangle$, для германия при $\mathbf{B} \parallel \langle 111 \rangle$ — долины, образующие триплет, а для направления $\mathbf{B} \parallel \langle 110 \rangle$ — нижний дублет (см. Приложение 1). Как мы увидим далее, характерной длиной, определяющей основной вклад в рассеяние, является магнитная длина $\lambda = \sqrt{\hbar c / eB}$, поэтому решение задачи о рассеянии на примеси в приближении дальнего действия возможно, если λ больше характерного боровского радиуса в материале:

$$\lambda \gg a_B. \quad (5.1)$$

Для кремния вблизи резонансных значений поля это условие выполнено с некоторым запасом (см. (2.2)), тогда как для германия λ и a_B , очевидно, одного порядка. Данный факт не означает отсутствия в германии эффекта как такового, но следует иметь в виду, что полученный ниже ответ применительно к Ge справедлив лишь по порядку величины.

Вырождение в точке пересечения уровней $2s$ и $2p_-$ снимается при учете возмущающего потенциала. Если примесь возбуждена и находится в одном из двух состояний, возникших из-за $2s-2p_-$ -гибридизации, то энергия связанного электрона зависит (причем в окрестности точки пересечения линейным образом) от электрического поля, создаваемого налетающим свободным носителем. С другой стороны, совместная энергия нейтрального донора и носителя определяется только их относительным пространственным положением, поэтому можно сказать, что на электрон проводимости действует потенциал рассеяния поля донора. В этом рассуждении очевидным образом подразумевается адиабатичность действия электрона проводимости на связанный электрон, так что задачу о собственных состояниях для каждого из них можно решать поочередно, используя «медленность» переменных (как пространственных, так и времени), описывающих состояние электрона проводимости. Элементарная оценка показывает, что адиабатичность в окрестности точки вырождения имеет место, если энергия ϵ свободного носителя, отсчитанная от нулевого уровня Ландау, удовлетворяет неравенству

$$\epsilon \ll \frac{m_z e^4}{\hbar^2 \kappa^2} \left(\frac{a_B}{r} \right)^2 \sim \frac{m_z e^4}{\hbar^2 \kappa^2} \left(\frac{a_B}{\lambda} \right)^2 = \hbar \Omega_z, \quad (5.2)$$

где m_z — эффективная масса продольного движения вдоль \mathbf{B} , Ω_z — соответствующая циклотронная частота, r — положение зонного электрона относительно примесного центра. При $\epsilon < 10$ К условие адиабатичности можно считать выполненным.

В дальнейшем в этом разделе, если специально не оговорено, будем использовать величины в их обычной размерности. Поместим начало координат, как и прежде, в

точку расположения центральной ячейки, содержащей ион примеси. Пусть \vec{r} — координата связанного электрона, а \mathbf{r} — электрона проводимости, тогда кулоновская энергия взаимодействия донора с электроном проводимости определяется в дипольном приближении как

$$\frac{e^2}{\kappa} \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \vec{r}|} - \frac{1}{r} \right) \approx \frac{e^2 \vec{r} \mathbf{r}}{\kappa r^3}, \quad r \gg \vec{r}. \quad (5.3)$$

Отсюда стандартным образом по теории возмущений находим энергию вблизи точки вырождения как функцию адиабатической переменной \mathbf{r} :

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{(\Delta E)^2}{4} + \frac{e^4 |\mathbf{d}\mathbf{r}|^2}{\kappa^2 r^6}} + \frac{E_{2s} + E_{2p_-}}{2}, \quad (5.4)$$

причем $\Delta E(B) = E_{2s}(B) - E_{2p_-}(B)$ — разность энергий невозмущенных уровней, а $\mathbf{d} = \langle 2s | \vec{r} | 2p_- \rangle$ — матричный элемент, в котором угловые скобки означают свертку по координатам связанного электрона. Теперь из энергии (5.4) следует вычесть энергию донора при $|\mathbf{r}| = \infty$, т. е. величину E_{1s} или E_{2p_-} в зависимости от знака перед корнем. После чего получим эффективный потенциал взаимодействия электрона проводимости с донором:

$$U_{\pm}(\mathbf{r}) = \pm \left(\sqrt{\frac{(\Delta E)^2}{4} + \frac{e^4 |\mathbf{d}\mathbf{r}|^2}{\kappa^2 r^6}} - \frac{|\Delta E|}{2} \right). \quad (5.5)$$

Напомним, что входящие сюда величины зависят от магнитного поля как от параметра, кроме того, ΔE обращается в нуль в точке вырождения. Соответствующую величину поля мы обозначим как B_0 (или \mathcal{B}_0 в безразмерном виде). В свою очередь, B_0 зависит, как мы видели, от ориентации долины электрона проводимости относительно направления \mathbf{B} . Формулы (5.4), (5.5) справедливы, если расстояние до других уровней достаточно велико:

$$|\Delta E| \ll |E_{2s} - E_i|, \quad i \neq 2p_-, 2s \quad (5.6)$$

(предполагается, что сила дипольного перехода из состояний $2s$ или $2p_-$ в другие состояния меньше или того же порядка, что и величина $|\mathbf{d}|^2$). Знак потенциала взаимодействия (5.5) зависит от того, в каком конкретно, нижнем или верхнем, гибридинзованном состоянии находится донор; на дальнейших ответах знак U не сказывается.

Приступим к расчету характеристик рассеяния электрона на примесном потенциале (5.5). Ось z независимо от ориентации эллипсоида эффективной массы выберем вдоль поля \mathbf{B} , а ось y вдоль поля \mathbf{F} . В первом неисчезающем приближении по рассеянию квантовомеханический ответ для поперечной диагональной проводимости, как известно [38], оказывается совпадающим с квазиклассическим выражением (см. также [36, 37])

$$\sigma_{yy} = -\frac{e^2}{2V} \sum_{\nu\nu'} \frac{df}{d\epsilon} (y_0 - y'_0)^2 W_{\nu\nu'}, \quad (5.7)$$

которое легко получить рассматривая поперечную диффузию ларморовских «кружков» [35]. В этой формуле индексы ν и ν' обозначают полные наборы квантовых чисел, характеризующих начальное и конечное (после рассеяния) состояние электрона,

$W_{\nu\nu'}$ — вероятность рассеяния, $f(\epsilon)$ — распределение электронов по энергии в зоне проводимости (в равновесии f — фермиевская функция), $V = L_x L_y L_z$ — объем образца. Формула (5.5) предполагает, что представление состояний электрона выбрано в таком виде, что величины y_0 и y'_0 являются сохраняющимися, т.е. могут быть выражены через соответствующий набор ν или ν' . В классическом случае y_0 — это y -координата ларморовского кружка, а в квантовом случае — положение равновесия магнитного осциллятора Ландау. Таким образом, представление волновой функции электрона проводимости определено с использованием калибровки Ландау ($A_x = -By$, $A_y = A_z = 0$), причем очень существенно, что выбор оси y жестко регламентирован направлением поля \mathbf{F} . Разумеется, в изотропном случае это не имеет значения, но в задаче с анизотропной эффективной массой мы должны учитывать, что волновая функция свободного электрона в магнитном поле теперь зависит от направления \mathbf{F} , даже если величина самого электрического поля при этом пренебрежимо мала.

Решение уравнения Шредингера сводится к осцилляторным функциям и в случае произвольной ориентации осей эллипсоида эффективной массы относительно \mathbf{V} и \mathbf{F} . В зависимости от этой ориентации лишь перенормируется магнитная длина. Мы, тем не менее, упростим задачу. Будем, во-первых, считать электрическое поле достаточно слабым:

$$eF\lambda \ll \hbar\Omega_z, \quad (5.8)$$

что обычно выполнено при наличии в материале электронов проводимости (т.е. для характерных полей $F \lesssim 10$ В/см) и означает возможность пренебречь величиной F в уравнении Шредингера⁵⁾. Во-вторых, мы ограничимся случаем, когда поле \mathbf{V} направлено вдоль одной из главных осей тензора эффективной массы, а именно, ориентировано перпендикулярно оси вращения долины зонного электрона, т.е. $m_z = m_\perp$, $m_{xz}^{-1} = m_{yz}^{-1} = 0$. И, наконец, учитывая, что в силу (5.2) имеет место соотношение $\epsilon \ll \hbar\Omega_z$, ограничимся учетом лишь одного нулевого уровня Ландау. В результате набор ν определяется только волновыми векторами k_x и k_z , а энергия свободного электрона, $\hbar\Omega_E/2 + \epsilon$, только квантовым числом k_z (здесь $\epsilon = \hbar^2 k_z^2 / 2m_\perp$, $\Omega_E = \Omega\sqrt{\gamma}$ — циклотронная частота, отвечающая в данном случае ориентации типа E). Волновая функция зонного электрона

$$\Psi_\nu = \frac{[\text{Re } \eta(\alpha)/\pi]^{1/4}}{\sqrt{L_x L_z \lambda}} \exp \left[-\frac{\eta(\alpha)(y - y_0)^2}{2\lambda^2} + ik_x x + ik_z z \right], \quad y_0 = \hbar k_x c / eB, \quad (5.9)$$

зависит от угла α , который образует ось y с осью симметрии эллипсоида эффективной массы. Эта зависимость в (5.9) задана комплексной функцией

$$\eta(\alpha) = \frac{\sqrt{\gamma} - i(1 - \gamma) \sin 2\alpha/2}{\sin^2 \alpha + \gamma \cos^2 \alpha}. \quad (5.10)$$

Вероятность рассеяния определяется известным выражением

$$W_{\nu\nu'} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\nu\nu'}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon'), \quad (5.11)$$

⁵⁾ Тем более, в силу (5.1), пренебрежима роль внешнего электрического поля в снятии вырождения состояния $2s-2p_-$ по сравнению с учитываемым полем зонного электрона.

где

$$U_{\nu\nu'} = \langle \nu | \sum_i U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | \nu' \rangle \quad (5.12)$$

— матричный элемент суммарного возмущения примесей, расположенных в точках \mathbf{R}_i , а $U(\mathbf{r})$ определяется формулой (5.5). Если примеси распределены в пространстве хаотически, то после подстановки (5.12) в (5.11) и суммирования по i мы убедимся, что «интерференционные» члены оказываются исчезающе малыми, так что суммирование и возведение в квадрат можно поменять местами. Кроме того, сумму по примесям следует, очевидно, заменить интегрированием по следующему правилу $\sum_i \rightarrow \int n_d^* d\mathbf{R} = n_d^* L_x L_z \int dY$, где n_d^* — концентрация возбужденных доноров, которую мы считаем однородной. В результате, подставляя (5.9) в (5.12), получим

$$W_{\nu\nu'} = \frac{2\hbar^3 n_d^* \lambda}{m_{\perp}^2 L_x L_z} \delta(\epsilon - \epsilon') \mathcal{F} \left(\frac{y_0 - y'_0}{\lambda}, \lambda k_z - \lambda k'_z \right), \quad (5.13)$$

где безразмерная функция

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(v, q) = & \rho \exp \left(-\frac{|\eta|^2 v^2}{2q} \right) \times \\ & \times \int_{-\infty}^{\infty} du \left| \int d^3 \bar{\mathbf{r}} \mathcal{U}(\bar{\mathbf{r}}) \exp \left[-iv\bar{x} - iq\bar{z} - \rho \left(\bar{y} - u + \frac{iv\vartheta}{2} \right)^2 \right] \right|^2 \end{aligned} \quad (5.14)$$

появилась следующим образом: мы перешли к безразмерным переменным $\mathbf{r} - \mathbf{R} = \lambda \bar{\mathbf{r}}$, $y_0 - Y = \lambda(u + v/2)$, $y'_0 - Y = \lambda(u - v/2)$, $k_z - k'_z = q\lambda^{-1}$ и безразмерному потенциалу $\mathcal{U} = U/\hbar\Omega$ и, кроме того, интегрирование по Y заменили интегрированием по u . В (5.14) использованы также обозначения $\rho(\alpha) = \text{Re } \eta(\alpha)$ и $\vartheta(\alpha) = \text{Im } \eta(\alpha) / \text{Re } \eta(\alpha)$.

Следует заметить, что здесь при расчете мы уже воспользовались борновским приближением, т. е. в (5.12) оба, «начальное» $|\nu\rangle$ и «конечное» $|\nu'\rangle$, состояния считались невозмущенными, т. е. заданными функциями (5.9). Возможность такого приближения следует обосновать; по этому поводу см. Приложение 3.

5.1. Время жизни зонного состояния (продольная характеристика рассеяния)

Упругость рассеяния означает, что величина q равна либо нулю, либо $2\lambda k_z$. Очевидно также, что ненулевое значение q всегда вносит меньший вклад в обратное время жизни состояния ν зонного электрона,

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{\nu'}^{v' \neq v} W_{\nu, \nu'}, \quad (5.15)$$

чем вклад рассеяния с сохранением k_z . В то же время из условия (5.2) следует, что возможные значения q во всяком случае малы ($q \ll 1$), так что рассеяние с сохранением знака k_z и с изменением на противоположный в главном приближении равновероятны. В дальнейшем мы будем всюду считать, что $q = 0$.

Прежде чем рассчитывать поперечную проводимость, найдем величину (5.15). Сначала сделаем это непосредственно в окрестности точки вырождения B_0 , считая, что

$$\mathcal{U} \approx \frac{e^2 |\mathbf{d}\bar{\mathbf{r}}| m_{\perp}}{\kappa \hbar^2 \bar{r}^3}. \quad (5.16)$$

В результате,

$$\int \mathcal{U}(\bar{r}) d\bar{z} = \frac{\mathcal{D}}{\sqrt{\bar{x}^2 + \bar{y}^2}}, \quad (5.17)$$

где $\mathcal{D}(\mathbf{B})$ — безразмерный матричный элемент,

$$\mathcal{D} = \begin{cases} \langle 2s | \rho e^{i\varphi} | 2p_{-1} \rangle & \text{для эллипсоида } A \text{ (см. разд. 3),} \\ 2 \langle 2s | z | 2p_{-} \rangle & \text{для эллипсоида } E \text{ (разд. 4).} \end{cases} \quad (5.18)$$

В этой формуле угловые скобки употребляются в том же смысле, что и, например, в (3.1), т. е. означают усреднение в безразмерном базисе x, y, z , использованном в предыдущих разделах. Вычисление \mathcal{D} , таким образом, как раз и представляет собой случай, когда необходимо знать волновые функции связанных электронных состояний донора. Наш расчет показывает, что непосредственно в точке $B = B_0$ значения безразмерной величины (5.18) таковы:

для Ge $|\mathcal{D}_A|^2 = 0.25$ при $\mathcal{B}_0^{(A)} = 1.50$ и $|\mathcal{D}_E|^2 = 8.2$ при $\mathcal{B}_0^{(E)} = 2.54$

для Si $|\mathcal{D}_A|^2 = 3.73$ при $\mathcal{B}_0^{(A)} = 0.16$ и $|\mathcal{D}_E|^2 = 16.8$ при $\mathcal{B}_0^{(E)} = 0.575$.

Заметим, что, переходя к (5.17), мы при выводе пренебрегли величиной ΔE в формуле (5.5). Это означает, что интегрирование в (5.14) по \bar{r} имеет смысл, если основной вклад дают значения

$$\bar{r} \ll \sqrt{|\mathcal{D}| \hbar \Omega / |\delta E|}. \quad (5.19)$$

Здесь $\delta E = \max(\Delta E, eF\lambda)$. Другая оценка верхней границы \bar{r} следует из условия адиабатичности (5.2) и фактически, поскольку $\mathcal{D} \sim 1$, сводится к подстановке в (5.19) ϵ вместо δE . Кроме того, естественно, значение \bar{r} ограничено сверху средним межпримесным расстоянием

$$\bar{r} \ll n_d^{*-1/3} / \lambda. \quad (5.19')$$

Для вычисления обратного времени рассеяния (5.15) перейдем от суммирования по ν' к интегрированию: $\sum_{\nu'} = \int d\epsilon' g(\epsilon') \int dy'_0$, причем

$$g(\epsilon) = \frac{4L_x L_z \sqrt{m_{\perp}} / 2\epsilon}{(2\pi\lambda)^2 \hbar} \quad (5.20)$$

— плотность квантовых состояний в нулевой зоне Ландау на единицу энергии и единицу длины вдоль y . Множитель 4 в выражении (5.20) соответствует двум возможным знакам k_z при заданном значении ϵ и двум спиновым состояниям. В результате

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{\sqrt{2} \hbar^2 n_d^*}{\pi^2 m_{\perp}^{3/2} \sqrt{\epsilon}} \int_{-\infty}^{\infty} dv \mathcal{S}(v, 0), \quad (5.21)$$

а в выражении для $\mathcal{S}(v, 0)$ надлежит воспользоваться результатом интегрирования по \bar{z} (5.17), (5.18). После этого окажется, что интеграл (5.21) формально логарифмически расходится при малых $|v|$, так как в этом случае для него справедлива формула (П.2.8), полученная в Приложении 2. Разумеется, расходимость легко устраняется: интегрирование по \bar{x} , выполненное при получении (П.2.3), (П.2.4) предполагает, что на

границах области интегрирования имеет место условие $|v\bar{x}| \gg 1$, поэтому обрезание при малых $|v|$ происходит на значениях \bar{v} , обратных величине, стоящей в правой части неравенств (5.19), (5.19'). В результате время между столкновениями может быть найдено с логарифмической точностью:

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{2^{5/2}\pi|\mathcal{D}(\mathbf{B}_0)|^2\hbar^2 n_d^* \Lambda}{\sqrt{m_{\perp}^3} \epsilon}, \quad (5.22)$$

где $\Lambda = -\ln(\lambda n_d^{*1/3} + \delta E/|\mathcal{D}|\hbar\Omega)$, причем $\delta E = \max(|E(B) - E(B_0)|, |eF\lambda|, \epsilon)$.

Любопытно, что частота столкновений (5.22) не содержит константу взаимодействия. Эта величина (e^2/κ) «сокращается», так как входит в (5.4), (5.5), (5.16) дважды: как множитель, определяющий поле возмущения зонного электрона, и как делитель, из-за того что для связанного электрона $|\mathbf{d}| \sim a_B \propto \kappa/e^2$. Само собой, константа взаимодействия не входит в ответ лишь до тех пор, пока выполнено условие дальнего действия (5.1).

Существенным моментом является то, что для справедливости получаемых ответов время τ должно быть ограничено как сверху, так и снизу. Ограничение сверху связано с предположением, что именно данный канал рассеяния является доминирующим. Другие неизбежно присутствующие в нашей системе каналы — рассеяние на акустических фононах и рассеяние на нейтральных, но невозбужденных донорах, число которых n_d может превосходить n_d^* , но потенциал создаваемого ими возмущения является короткодействующим. Обратим внимание на то, что время жизни зонного состояния есть величина того же порядка, что и время релаксации продольного импульса (см. [2, § 14.1]). Последнее, как известно [2, 37, 38], слабо зависит от магнитного поля и может быть оценено из экспериментальных значений подвижности в невырожденном полупроводнике при $\mathbf{B} = 0$. При температуре $T < 10$ К подвижность достигает в кремнии значений $10^5 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, если $n_d \lesssim 10^{14} \text{ см}^{-3}$, а в германии — $10^6 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ при $n_d < 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (см. [48, 49], а также цитированные там работы). Таким образом, характерное время релаксации продольного импульса τ_0 , определяемое другими каналами рассеяния, оказывается порядка 10 пс, что вполне согласуется с теоретическими расчетами τ_0 в ультраквантовом случае DA -рассеяния на фононах ([2, § 14.3]), т. е. при $\epsilon \lesssim \hbar s/\lambda$ (s — скорость звука). Неравенство $\tau < \tau_0$ накладывает условие на величину концентрации возбужденных примесей; из (5.22) получаем, что должно быть $n_d^* \gtrsim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ для Si и $n_d^* \gtrsim 10^{11} \text{ см}^{-3}$ для Ge. В этом смысле в условиях, когда $n_d^* < n_d$, более предпочтительным материалом оказывается германий.

Кроме приведенной оценки, основанной на эксперименте, представляется полезным сравнить (5.22) с теоретическим временем релаксации, определяемым рассеянием на нейтральном невозбужденном доноре. К сожалению, из-за неприменимости приближения дальнего действия эта задача является весьма сложной, так что вплоть до настоящего времени вопрос исследован довольно слабо. Тем не менее для оценок можно воспользоваться результатами, получаемыми в рамках модели Эжинсоа [39]. Речь в этом случае идет, разумеется, о неборновском случае: рассматривается задача о рассеянии водородоподобным атомом (с введением в модель диэлектрической проницаемости среды и эффективной массы) при учете обменного взаимодействия рассеиваемого и связанного электронов. Область взаимодействия частиц порядка a_B . Для наших оценочных целей удобно, тем не менее, определить некоторый эффективный потенциал рассеяния, дающий в борновском случае в нулевом магнитном поле для сечения такой же ответ, как и

в [39], после чего уже для этого потенциала решать задачу о рассеянии в квантующем (см. (5.2)) магнитном поле. Именно такая схема расчета времени релаксации на нейтральной примеси была использована в работе [50]. В результате оказывается, что, так же как и (5.22), это время (обозначим его τ_{Er}) пропорционально $\sqrt{\epsilon}$ ⁶⁾, а отношение времен оказывается равным

$$\frac{\tau(\epsilon)}{\tau_{Er}(\epsilon)} = \frac{15n_d a_B}{64\sqrt{2\pi}|\mathcal{D}|^2 \Lambda n_d^* \lambda} \quad (5.23)$$

(мы пренебрегли здесь анизотропией эффективной массы). Таким образом, релаксация по Эржинсоу в интересующих нас случаях происходит медленнее по крайней мере на два порядка, и эффект дальнего действия окажется заметным уже начиная с $n_d^*/n_d \sim 0.01$.

Наконец, определим ограничение на τ снизу. Оно связано с применимостью формулы нестационарной теории возмущений (5.11) и возникает из требования $\tau > \delta\tau$, где $\delta\tau$ — квантовомеханическая неопределенность времени, т. е. $\delta\tau \sim \hbar/\bar{\epsilon} > \hbar/\epsilon$. Величина $\bar{\epsilon}$ представляет собой минимальную энергию, при которой применима наша теория. Объединив выписанные неравенства, найдем с учетом (5.22), что

$$\epsilon > \bar{\epsilon} \sim \frac{\hbar^2(n_d^* \Lambda)^{2/3} |\mathcal{D}|^{4/3}}{m_{\perp}} \quad (5.24)$$

Этот результат означает фактически, что де-бройлевская длина волны свободного электрона в направлении магнитного поля должна быть ограничена сверху длиной пробега $\tau\sqrt{\epsilon/m_{\perp}}$.

Теперь можно вычислить обратное время (5.21) и в более широкой окрестности резонанса, не пренебрегая величиной ΔE в (5.5). Тогда выражения (5.16), (5.17) несправедливы, и интегрирование в (5.21) выполнить аналитически не удастся. В результате имеем

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \frac{16\sqrt{2}\pi^2 \hbar^2 n_d^*}{\sqrt{m_{\perp}^3} \epsilon} \mathcal{F}_{\parallel}(\mathcal{B}). \quad (5.25)$$

Функция \mathcal{F}_{\parallel} вычисляется по-разному в зависимости от того, к какому типу, A или E , принадлежит долина локализованного электрона:

$$\mathcal{F}_{\parallel}^{(A,E)}(\mathcal{B}) = \frac{|\mathcal{D}|^2}{2\pi} G_{\parallel}^{(A,E)} \left(\frac{\Delta \mathcal{E}}{4\mathcal{B}|\mathcal{D}|} \right). \quad (5.26)$$

Здесь

$$G_{\parallel}^{(A,E)}(\zeta) = \frac{\rho}{\pi^3} \int_0^{\infty} dv e^{-v^2/2} \int_{-\infty}^{\infty} du \mathcal{L}_{A,E}(\varrho, \zeta, u, v), \quad (5.27)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{A,E} &= \int_0^{\infty} d\bar{x} \cos(v\bar{x}) \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} e^{-e(\bar{y}-u)^2} \int_0^{\infty} d\bar{z} \times \\ &\times \left[\sqrt{\zeta^2 + \frac{s_{A,E}(\bar{r})}{(\bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2)^3}} - |\zeta| \right], \end{aligned} \quad (5.27')$$

⁶⁾ Если $B = 0$, то τ_{Er} в модели [39] от энергии носителя не зависит.

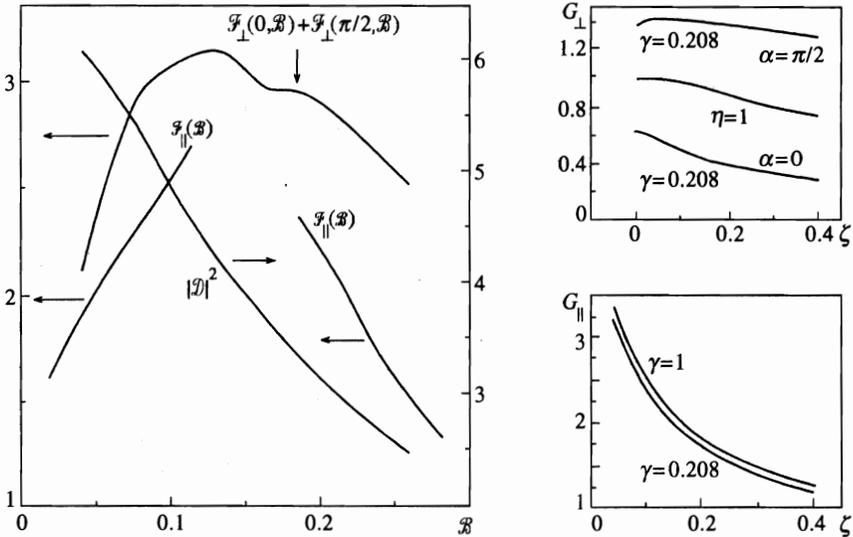


Рис. 6. Результат расчета безразмерных величин (см. текст), определяющих поведение транспортных характеристик рассеяния в условиях упругого магнитопримесного резонанса. Рассмотрен случай, когда связанное состояние принадлежит А-долине в кремнии, индекс А всюду опущен. По горизонтальной оси (левой) части рисунка отложено приведенное к безразмерному виду согласно (2.2) магнитное поле. Точка пересечения уровней $2s$ и $2p_{-1}$ соответствует значению $B = 0.16$

причем $s_A = \bar{x}^2 + \bar{y}^2$, $s_E = \bar{z}^2$. В формуле (5.26) $\Delta \mathcal{E}$ — приведенная к безразмерному виду по правилу (2.2) разность энергий ΔE . В выражении (5.14) для $\mathcal{S}(v, 0)$ мы положили $\alpha = \pi/2$, так как из физических соображений ясно, что наш ответ от угла α зависеть не будет. В этом можно убедиться и непосредственно, исследуя интеграл (5.21). Таким образом в (5.27), (5.27') $\rho = \sqrt{\gamma}$. Естественно также, что функция (5.27) инвариантна по отношению к замене $\rho \rightarrow 1/\rho$.

Заметим, что межстолкновительное время (5.21), (5.22), (5.25) позволяет найти величину продольной проводимости

$$\bar{\sigma}_{zz} = ne^2 \langle \langle \tau \rangle \rangle / m_{\perp}, \tag{5.28}$$

где концентрация зонных электронов —

$$n = 4 \int d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{L_x L_z} f(\epsilon), \tag{5.29}$$

а двойные угловые скобки означают усреднение по энергии, которое здесь можно выполнить по той же схеме, что и в отсутствие магнитного поля [2, § 7.2]. Фактическая одномерность задачи в условиях квантующего магнитного поля приводит к ответу

$$\langle \langle \tau \rangle \rangle = -\frac{8}{n} \int d\epsilon \frac{df}{d\epsilon} 2\epsilon \tau(\epsilon) \frac{g(\epsilon)}{L_x L_z}. \tag{5.30}$$

Множитель 4 в (5.29) соответствует четырем состояниям зонного квадруплета в Si. Кроме того, следует учесть, что в рассматриваемом приближении (5.2) частота столкнове-

ний, происходящих с изменением знака k_z , ровно в два раза меньше, чем полная частота $1/\tau$, отсюда появление множителя 8 в (5.30).

В нашем случае $f(\epsilon)$ есть распределение неравновесных электронов на нулевом уровне Ландау. Если считать, что оно характеризуется некоторой эффективной температурой, $f = f'(\epsilon/T^*)$, то $\bar{\sigma}_{zz} \propto T^*$. Зависимость от магнитного поля определяется функцией (5.26) и для случая A -долины продемонстрирована ниже на рис. 6.

5.2. Расчет σ_{yy} (поперечное рассеяние)

Подставим в (5.7) выражение (5.14) и заменим суммирование интегрированием:

$$\sum_{\nu\nu'} = \frac{1}{2} \iint d\epsilon d\epsilon' g(\epsilon)g(\epsilon') \iint dy_0 dy'_0.$$

Появление здесь множителя $1/2$ объясняется тем, что при рассеянии спиновое состояние электрона проводимости не меняется, поэтому спиновое удвоение плотности состояний следует учесть лишь один раз в одной из функций $g(\epsilon)$. В (5.14), так же как и при расчете частоты столкновений (5.22), следует положить $q = 0$. В итоге приходим к ответу

$$\sigma_{yy}(\alpha) = -\frac{e^2 \hbar m_d^*}{\pi m_{\perp} \sqrt{\mathcal{B}}} \mathcal{F}_{\perp}(\alpha, \mathcal{B}) \int_{\epsilon > \bar{\epsilon}} \frac{df}{d\epsilon} \frac{d\epsilon}{\epsilon}. \tag{5.31}$$

Функция безразмерного магнитного поля \mathcal{B} и угла α определяется выражением

$$\mathcal{F}_{\perp}^{(A,E)}(\alpha, \mathcal{B}) = \sqrt{\mathcal{B}} |\mathcal{D}|^2 G_{\perp}^{(A,E)}\left(\eta(\alpha), \frac{\Delta \mathcal{E}}{4\mathcal{B}|\mathcal{D}|}\right), \tag{5.32}$$

где

$$G_{\perp}^{(A,E)}(\eta, \zeta) = \frac{4\varrho}{\pi^3} \int_0^{\infty} v^2 dv \exp\left(-\frac{|\eta|^2 v^2}{2\varrho}\right) \int_{-\infty}^{\infty} du |K_{A,E}(\eta, \zeta, u, v)|^2, \tag{5.33}$$

$$K_{A,E}(\eta, \zeta, u, v) = \int_0^{\infty} d\bar{x} \cos(v\bar{x}) \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \exp\left[-\varrho\left(\bar{y} - u + \frac{iv\vartheta}{2}\right)^2\right] \int_0^{\infty} d\bar{z} \times \\ \times \left[\sqrt{\zeta^2 + \frac{s_{A,E}(\bar{\mathbf{r}})}{(\bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2)^3}} - |\zeta| \right]. \tag{5.33'}$$

Разумеется, поперечная проводимость зависит от ориентации зонного эллипсоида, т. е. от угла α .

Если $\Delta \mathcal{E} = 0$, то выражение для функции $G(\eta, 0)$ существенно упрощается и не зависит от типа долины, A или E (см. формулы (П.2.9), (П.2.10) в Приложении 2). Кроме того, в принципе, существует ситуация, когда можно считать, что $\eta = 1$ (при этом $G(1, 0) \equiv 1$, см. (П.2.11)). Так будет, если электрон проводимости принадлежит нулевому уровню Ландау долины A , а не рассматриваемой до сих пор долине E . Такие зонные состояния расположены выше по энергии на $\hbar\Omega(1 - \sqrt{\gamma})/2$, но метастабильны

(«сваливание» электрона на дно зоны проводимости определяется междолинным переходом).

Интегралы (5.33)–(5.33') сходятся, так что магнитная длина, на которую проведено обезразмеривание, определяет характерную пространственную область вокруг примесного центра, вносящую главный вклад в поперечную проводимость. Как уже говорилось, на расстояниях $\lesssim a_B$ формула (5.5) неприменима и дальное действие отсутствует. Рассеяние в этой центральной части нами, естественно, не может быть учтено правильно. Если предположить, что в данной области пространства энергия взаимодействия носителя с донором остается по порядку величины равной «атомной энергии» $e^2/\kappa a_B$ (а для обратного утверждения нет совершенно никаких физических оснований), то мы, анализируя (5.33), (5.33'), легко приходим к выводу, что вклад в σ_{yy} центральной (и, очевидно, неборновской) части рассеяния мал по сравнению с (5.31) в меру малости безразмерного параметра a_B/λ . Заметим, что при расчете времени (5.22) соответствующее отношение вкладов еще меньше и равно $a_B/\lambda\lambda$. Так что продольное рассеяние является, так сказать, еще более дальнедействующим.

Интересно, что величину вклада расстояний $\lesssim a_B$ можно оценить и независимым образом, используя следующие соображения. Допустим, что дальнедействующая дипольная составляющая потенциала отсутствует. Например, так будет, если состояние донора есть чистое состояние $2p_-$ или $2s$. Расчет характеристик рассеяния в этом случае как раз и определит вклад центральной части. В оценках мы можем опять-таки исходить из модели Эржинсоа с той лишь разницей, что первоначальное (до рассеяния) состояние примеси есть соответствующее возбужденное, а не основное состояние «атома водорода». В результате для отношения времен жизни получим формулу, совпадающую по порядку величины с (5.23), в которой надо только положить $n_d^*/n_d = 1$. Для поперечной проводимости, как показывает оценка по формулам (5.14) и (5.7), в которых в качестве потенциала \mathcal{U} следует подставить соответствующий эффективный потенциал [50], тоже подтверждается приведенная выше оценка вклада (a_B/λ).

Мы рассчитали значения функции $G_{\perp}^{(A)}(\alpha, \zeta)$ для двух направлений, отвечающих значениям $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi/2$. В обоих этих случаях $\vartheta = 0$, но $\eta(0) = \varrho(0) = 1/\sqrt{\gamma}$, а $\eta(\pi/2) = \varrho(\pi/2) = \sqrt{\gamma}$. Результат расчета показан в правой верхней части рис. 6. Мы полагали, что $\gamma = 0.208$, т. е. рассмотрели случай, относящийся к кремнию в поле $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$ (см. рис. 2). Для сравнения приведены результаты расчета для $\eta = 1$. В правой нижней части рис. 6 демонстрируется зависимость $G_{\parallel}^{(A)}(\zeta)$ для $\varrho = \sqrt{0.208}$, 1. Зависимость от параметра γ здесь, как видно, еще менее существенна, а от угла α эта величина, естественно, вообще не зависит.

Обратим внимание на то, что формула (5.31) определяет вклад в проводимость только одной из долин. Если учесть все долины зонного квадруплета, то получим полную проводимость

$$\bar{\sigma}_{yy} = 2\sigma_{yy}(\alpha) + 2\sigma_{yy}(\pi/2 - \alpha). \quad (5.34)$$

Интеграл по энергии (5.31) легко вычисляется в логарифмическом приближении, если ввести эффективную температуру T^* , характеризующую распределение неравновесных зонных электронов: $(df/de)|_{e=0} = -f(0)/T^*$. Окончательно для Si и $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$ находим

$$\bar{\sigma}_{yy}(\alpha) = \frac{2e^2 \hbar n_d^* f(0)}{\pi m_{\perp} T^* \sqrt{\mathcal{B}}} \ln \left(\frac{T^*}{\bar{\epsilon}} \right) \left[\mathcal{F}_{\perp}(\alpha, \mathcal{B}) + \mathcal{F}_{\perp} \left(\frac{\pi}{2} - \alpha, \mathcal{B} \right) \right] \quad \text{при } T^* \gg \bar{\epsilon}. \quad (5.35)$$

Угол $\alpha = 0$ соответствует здесь направлению $\mathbf{F} \parallel \langle 010 \rangle$ или $\langle 100 \rangle$. В результате зависимость $\bar{\sigma}_{yy}$ от угла α является слабой (в частном случае это подтверждается формулой (П.2.10) для $G_{\perp}(\eta, 0)$). В основной части рис. 6 для случая A -долины демонстрируются зависимости $\mathcal{F}_{\parallel}(\mathcal{B})$, $\mathcal{F}_{\perp}(0, \mathcal{B}) + \mathcal{F}_{\perp}(\pi/2, \mathcal{B})$ и зависимость $|\mathcal{D}(\mathcal{B})|^2$, вычисленная в соответствии с правилом (5.18).

По формулам (5.22), (5.25), (5.28), (5.35) можно определить отношение поперечного и продольного магнитосопротивлений: $\rho_{yy}/\rho_{zz} = \sigma_{yy}\sigma_{zz}/\sigma_{xy}^2 \sim (e^2/\lambda\lambda\kappa T^*) \ln(T^*/\bar{\epsilon})$.

Если в полупроводнике с невозбужденными донорами поперечная проводимость равна $\bar{\sigma}_{yy}^{(0)}$, а время релаксации продольного импульса τ_0 , то в результате возбуждения получим $\bar{\sigma}_{yy}/\bar{\sigma}_{yy}^{(0)} \sim \tau_0/\tau$, т. е. выигрыш определяется первой степенью отношения межстолкновительных времен и реально может быть невелик. Гораздо важнее проявление магнитопримесного резонанса в необычной функциональной зависимости $\bar{\sigma}_{yy}$ от B . Пусть в нашем материале холловская проводимость $\bar{\sigma}_{xy}$, тогда поперечное магнитосопротивление

$$\rho_{yy}(B) = \bar{\sigma}_{yy}/\bar{\sigma}_{xy}^2 \propto \mathcal{B}^{3/2} [\mathcal{F}_{\perp}(\alpha, \mathcal{B}) + \mathcal{F}_{\perp}(\pi/2 - \alpha, \mathcal{B})].$$

Отвлекаясь от немонотонности, определяемой функцией $\mathcal{F}_{\perp}(\alpha, \mathcal{B})$, видим, что, грубо говоря, магнитосопротивление растет с полем как $B^{3/2}$. Наш случай является в какой-то мере промежуточным между рассеянием на заряженных примесях (при этом ρ_{yy} не зависит от B , см. [2, § 14.3]) и рассеянием на точечных дефектах ($\rho_{yy} \propto B^2$, см. там же).

Главной особенностью, конечно, является немонотонная с максимумом в окрестности $B_0 = 10.5$ Тл зависимость от поля величин ρ_{zz} и $\rho_{yy}/B^{3/2}$.

Обратим внимание на то, что при переходе от ориентации A к ориентации E величина $|\mathcal{D}|$ сильно возрастает. В особенности это резко выражено для германия. Кроме того, в Ge, как это видно из рис. 3, зависимость ΔE от $B - B_0$ также является более «крутой», чем в случае A . Все это заставляет предполагать, что в эксперименте в этом полупроводнике, несмотря на фактическое невыполнение условия (5.1), исследуемый резонансный эффект будет (если направить магнитное поле вдоль $\langle 110 \rangle$) весьма значителен. Состояния как свободного, так и локализованного электронов при этом принадлежат долинам E -типа и определяются функциями Ванье нижнего долин-орбитального дублета (см. Приложение 1).

6. ОБСУЖДЕНИЕ

В предыдущем разделе мы подробно рассмотрели одно из возможных резонансных явлений в магнитопримесном рассеянии, руководствуясь прежде всего новизной предсказываемого эффекта. Мы далеки от того, чтобы здесь обсуждать конкретную реализацию эксперимента, но в то же время следует отметить принципиально неравновесный характер явления, что со своей стороны, по всей вероятности, должно привести к необходимости внешнего возбуждения доноров. Естественно использовать для этого источник излучения субмиллиметрового диапазона. В германии при $\mathbf{B} \parallel \langle 110 \rangle$ переход $1s(A_1) \rightarrow 2p_-$ (A_1 — единичное представление нижнего расщепленного дублета, см. рис. 7) является внутривалинным, т. е. «вертикальным», и поэтому возможно прямое резонансное возбуждение с частотой, определяемой энергией $E_{2p_-} - E_{1s(A_1)}$ в поле $B_0 \approx 16.7$ Тл.

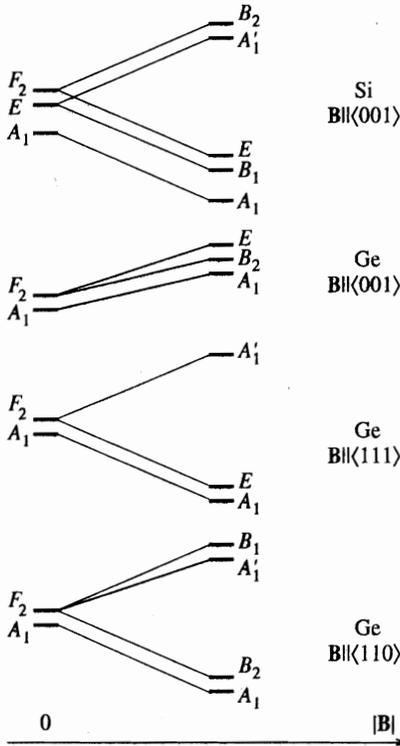


Рис. 7. Схема снятия магнитного вырождения уровней примеси замещения в кремнии и германии. Буквами слева указаны представления локальной группы симметрии примеси в нулевом поле, справа — представления локальной группы в конечном поле (см. табл. 3)

Вертикальное возбуждение в Si из основного состояния при $\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$ разрешено, если локализованный электрон остается внутри долины E , при этом из рис. 4 видно, что упругий магнитопримесный резонанс должен проявиться в полях, реально недостижимых в условиях стационарного эксперимента. Возбуждение $1s^{(E)}(A_1) \rightarrow 2p_{-1}^{(A)}$ при $B_0 \approx 10.5$ Тл является в Si непрямым. В то же время ясно, что в рассматриваемых условиях в кремнии при $T \gtrsim 1$ К «второе основное» состояние $1s^{(A)}(A_1)$ будет даже в равновесии в значительной степени заполнено, так как разность энергий в состояниях $1s^{(A)}(A_1)$ и $1s^{(E)}(A_1)$ мала (см. рис. 5 и 7). Очевидно, химический сдвиг существенно эту разность не изменит, в результате внешнее возбуждение в состоянии $2p_{-1}^{(A)}$ может быть вертикальным с энергией, равной $E_{2p_{-1}^{(A)}} - E_{1s^{(A)}(A_1)}$.

Заметим, что в результате возбуждения необязательно обеспечивать строго селективную заселенность резонансных состояний. В той или иной степени будут возбуждаться и нерезонансные состояния (например, $2p_0$), но эффективность рассеяния на них гораздо ниже, так как отсутствует дальное действие (дипольный момент равен нулю). Вклад в рассеяние для них можно оценить, используя опять-таки (5.23), считая, что n_d и n_d^* — концентрации соответственно нерезонансно и резонансно возбужденных примесей. При этом вклад в поперечную проводимость определяется отношением, аналогичным правой части (5.23); изменится только числовой коэффициент и в знаменателе исчезнет Λ . Разумеется, хотя формально оценка и остается прежней, вероятность рассеяния на возбужденном нерезонансном доноре несколько больше, чем в основном состоянии, так как эффективно возрастает a_B . В то же время ясно, что этот

канал нерезонансного рассеяния гораздо менее «опасен», чем рассеяние на донорах в основном состоянии, рассмотренное при выводе (5.23), из-за большой по сравнению с n_d^* концентрации последних.

Отметим, кроме того, что рассеяние, рассчитанное с помощью модели Эржин-соа, оказывается завышенным по сравнению с результатами реальных экспериментов (см. [2, § 9.1] и [39, 50]). В результате нерезонансные каналы (на донорах в основном или возбужденных состояниях) могут на самом деле оказаться еще менее существенны, чем это следует из сделанных оценок.

Другой особенностью эксперимента является обязательное наличие в материале свободных электронов. В данном случае логично достичь этого непосредственной инжекцией, используя омические контакты. Неравновесность носителей позволяет предположить, что возбуждение доноров, вероятно, будет в значительной степени самостоятельным (и, конечно, неселективным), т. е. часть доноров будет возбуждена из-за неупругого рассеяния на них зонных электронов. Распределение примесей по своим состояниям может оказаться существенно негиббсовским и, следовательно, отношение n_d^*/n_d — много большим своего равновесного значения. Важно при этом исключить ионизацию, т. е. кинетическая энергия свободных носителей ϵ должна быть все-таки меньше энергии связи донора в основном состоянии.

В заключение обратим внимание на то, что развитый в разд. 2–4 метод позволяет предсказать, а также в принципе и рассчитать поведение транспортных характеристик для других случаев магнитопримесных резонансов. Вернемся, например, к рис. 1 и 3. Главный пик неупругого резонанса отвечает условию совпадения энергии внутридолинного возбуждения $E_i - E_{1s}$ с циклотронной энергией, равной $\hbar\Omega_B$ (рис. 1) или $\hbar\Omega_E = \hbar\Omega\sqrt{\gamma}$ (рис. 3). В рамках приближения эффективной массы резонансные значения величины магнитного поля для $i = 2p_0, 2p_-, \dots$ легко определяются графически по пересечению штриховых линий на рис. 1 и 3 с соответствующими сплошными линиями спектра возбуждений. Для Si такой резонанс невозможен, так как энергия $E_{1s} + \hbar\Omega\sqrt{\gamma}$ оказывается для реальных значений $|B|$ всегда значительно ниже чем E_i ($i \neq 1s$), хотя возможны в принципе резонансы высокой кратности, когда $E_i - E_{1s} = M\hbar\Omega\sqrt{\gamma}$, где $M \geq 4$.

Наконец, рассмотрим значения поля, при которых край зоны проводимости (штрихпунктирная прямая на рис. 1, 2 и 3) пересекается уровнем энергии локализованного состояния. Эти пересечения представляют собой вероятные точки резонанса на квазидискретном уровне [51]. В принципе, такой тип резонанса для полупроводников в сильном магнитном поле теоретически изучался Андреевым [53, 54]. Им рассматривалась постановка задачи, которая требует выполнения определенных условий, накладываемых на потенциал примесного рассеяния и величину анизотропии. Возможность реализации этих условий в действительности остается невыясненной. В нашем случае резонансное рассеяние на квазидискретном уровне возникает естественным образом; донор следует считать ионизованным, поэтому экспериментальная ситуация оказывается весьма простой. Как следует из рис. 2, такой резонанс в Si может появиться только для состояний с $m > 0$ (см. вставку), тогда как в германии он должен иметь место и, в принципе, наблюдаем также и для всех рассмотренных локализованных состояний, исключая быть может, $2p_0^{(A)}$ (см. рис. 1). Резонансные значения магнитного поля достаточно точно определяются графически из рисунков, причем ясно, что использование приближения эффективной массы вполне оправдано (состояние $1s$ в этом эффекте никак не участвует). Расчет, характеризующий резонансы (см. рис. 1 и 2),

должен содержать малый и фактически неизвестный матричный элемент междолинного перехода из зоны, формируемой триплетом типа B в Ge или квадруплетом E в Si, в связанное состояние долины A . В то же время ясно, что этот факт не мешает получить в окончательных ответах правильную зависимость от поля вблизи резонансных точек; упомянутый матричный элемент не может содержать зависимость от \mathbf{B} , так как определяется характерным расстоянием порядка постоянной решетки, много меньшим чем магнитная длина. Наконец, данный тип резонанса может быть и внутримолекулярным. Действительно, из рис. 3 следует, что уровень состояния $2p_+^{(E)}$ пересекает край зоны проводимости, который в этом случае определяется той же самой E -долиной.

Авторы благодарны С. И. Губареву, В. Н. Звереву и С. В. Иорданскому за обсуждение, а также И. А. Лебедеву за участие в проведении некоторых расчетов. Один из авторов (С. М. Д.) благодарит за поддержку Российский фонд фундаментальных исследований (гранты 95-02-05883 и 96-02-17535).

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

В табл. 3 представлены результаты теоретико-группового анализа, показывающего характер снятия долин-орбитального вырождения для S -состояний примеси замещения

Таблица 3

	Поле	Группа кристалла (магнитный класс)	Локальная группа примеси замещения	Схема расщепления состояний	Генезис состояний при $\mathbf{B} \neq 0$ (рис. 7)
Si	$\mathbf{B} = 0$	O_h	T_d	$A_1 + E + F_2$	
	$\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$	$D_{4h}(C_{4h})$	D_{2d}	Дублет $\rightarrow A'_1 + B_2$ Квадруплет \downarrow $A_1 + B_1 + E$	$F_2 \rightarrow B_2 + E,$ $E \rightarrow A'_1 + B_1$
Ge	$\mathbf{B} = 0$	O_h	T_d	$A_1 + F_2$	
	$\mathbf{B} \parallel \langle 001 \rangle$	$D_{4h}(C_{4h})$	D_{2d}	Квадруплет \downarrow $A_1 + B_2 + E$	$F_2 \rightarrow B_2 + E,$
	$\mathbf{B} \parallel \langle 111 \rangle$	$D_{3d}(S_6)$	C_{3v}	Триплет $\rightarrow A_1 + E$ Синглет $\rightarrow A'_1$	$F_2 \rightarrow A'_1 + E,$
	$\mathbf{B} \parallel \langle 110 \rangle$	$D_{2h}(C_{2h})$	C_{2v}	Нижний дублет \downarrow $A_1 + B_2$ Верхний дублет \downarrow $A'_1 + B_1$	$F_2 \rightarrow A'_1 + B_1 + B_2$

в присутствии конечного магнитного поля. Мы используем общепринятые обозначения для групп и их представлений [45]. В последнем столбце табл. 3, а также на рис. 7 демонстрируется происхождение состояний в конечном поле из состояний примеси замещения при $\mathbf{V} = 0$. В работе [15] не учтено, что в германии, когда $\mathbf{V} \parallel \langle 001 \rangle$, триплет расщепляется в конечном поле на синглет и дублет. Расщепление, разумеется, мало в силу малости отношения постоянной решетки к магнитной длине.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Рассмотрим формулы пятого раздела (5.5), (5.14), (5.21), (5.26), (5.27') и (5.32), (5.33') в том случае, когда $\Delta E = \Delta \mathcal{E} = \zeta = 0$. Интеграл в (5.21) и представления (5.27) и (5.33) для функций $G_{\parallel, \perp}^{A, E}$ сводятся после выполнения интегрирования (5.17) по \bar{z} к следующему выражению:

$$I = \frac{4\rho}{\pi^3} \int_0^\infty \beta(v) dv \exp\left(-\frac{|\eta|^2 v^2}{2\rho}\right) \int_{-\infty}^\infty du |Q(u, v)|^2. \quad (\text{П.2.1})$$

Здесь величина $\beta(v)$ равна постоянной $2|\mathcal{D}|^2 \pi^3$ или $1/4$ в том случае, если вычисляется соответственно интеграл (5.21) или (5.27), или же $\beta = v^2$, если речь идет о $G_\perp(\eta, 0)$. Формула для $Q(u, v)$ имеет вид

$$Q = \int_{-\infty}^\infty dy \int_0^\infty dx \frac{\exp[-\rho(y-u+iv\vartheta/2)^2]}{\sqrt{x^2+y^2}} \cos(vx), \quad (\text{П.2.2})$$

причем интеграл по x является табличным и приводит к функции Макдональда $K_0(|vy|)$. В результате интеграл от $|Q|^2$ представляется в виде

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^\infty du Q Q^* &= \int_{-\infty}^\infty du R(v) \exp\left[\frac{\rho\vartheta^2 v^2}{2} - 2\rho\left(u - \frac{y_1 + y_2}{2}\right)^2\right] = \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} R(v) \exp\left(\frac{\rho\vartheta^2 v^2}{2}\right), \end{aligned} \quad (\text{П.2.3})$$

где

$$R(v) = \int_{-\infty}^\infty dy_1 \int_{-\infty}^\infty dy_2 K_0(|vy_1|) K_0(|vy_2|) \exp\left[iv\vartheta\rho(y_1 - y_2) - \frac{\rho(y_1 - y_2)^2}{2}\right]. \quad (\text{П.2.4})$$

Теперь подставим (П.2.3) в (П.2.1):

$$I = \frac{2}{\pi^3} \sqrt{2\pi\rho} \int_0^\infty \beta(v) dv e^{-\rho v^2/2} R(v). \quad (\text{П.2.5})$$

От переменных y_1 и y_2 в (П.2.4) перейдем к $s = v(y_1 + y_2)/2$ и $r = y_1 - y_2$:

$$R(v) = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^\infty ds \int_{-\infty}^\infty dr K_0\left(\left|s + \frac{vr}{2}\right|\right) K_0\left(\left|s - \frac{vr}{2}\right|\right) \exp\left(-\frac{\rho r^2}{2} + i\rho\vartheta vr\right). \quad (\text{П.2.6})$$

Таким образом, если $\beta(v) = \text{const}$, то интеграл по v (П.2.5) логарифмически расходится в нуле. При наличии механизма обрезания на малых $v \sim \bar{v}$ он может быть определен, причем в подинтегральной функции в (П.2.6) в этом случае важны значения $s \sim r \sim 1 \gg vr$, так что

$$R(v) \approx \frac{1}{v} \sqrt{\frac{2\pi}{\varrho}} \int_{-\infty}^{\infty} K_0^2(|s|) ds. \quad (\text{П.2.7})$$

Стоящий здесь интеграл вычисляется аналитически (см. [54, п. 2.16.33.2]) и равен $\pi^2/2$. Итак, если $\beta(v) = 2|\mathcal{D}|^2\pi^3$, то в (5.21) имеем

$$I = \int dv \mathcal{S}(v, 0)|_{\Delta E=0} = 4\pi^3 |\mathcal{D}|^2 \int_{v>|\bar{v}|} \frac{dv}{v}. \quad (\text{П.2.8})$$

Теперь упростим выражение (2.5) в том случае, когда $\beta = v^2$. Переходя в (П.2.6) к переменным $t_1 = vy_1$, $t_2 = vy_2$, подставим формулу (П.2.6) в (П.2.5) и выполним табличное интегрирование по v . Отсюда

$$G_{\perp}(\eta, 0) = \frac{2}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 K_0(|t_1|) K_0(|t_2|) \exp[-\varrho|t_1 - t_2| + i\varrho\vartheta(t_1 - t_2)]. \quad (\text{П.2.9})$$

Если $\varrho \ll 1$ или же $\varrho \gg 1$, то при любых значениях $\varrho\vartheta$ интеграл (П.2.9) в главном приближении факторизуется. В первом случае он сводится к $(\int K_0(t) \cos(\varrho\vartheta t) dt)^2$, во втором — к уже рассмотренному выше интегралу $\int K_0(|t|)^2 dt$. Поэтому, учитывая выражение (5.10) для $\eta(\alpha)$, найдем

$$G_{\perp}(\eta, 0) = \begin{cases} 2 \sin^2 \alpha, & \text{если } \gamma \ll 1, \text{ но } \alpha \gg \sqrt{\gamma}, \\ 2\sqrt{\gamma}, & \text{если } \alpha^2 \lesssim \gamma \ll 1. \end{cases} \quad (\text{П.2.10})$$

Наконец, интеграл (П.2.9) берется точно в том случае, когда $\eta \equiv 1$ (т. е. $\varrho = 1$, $\vartheta = 0$). С помощью таблиц (см. [54, пп. 1.12.2.2, 1.12.2.3]) нетрудно получить, что

$$G_{\perp}(1, 0) \equiv 1. \quad (\text{П.2.11})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Обоснование применимости борновского приближения существенно зависит от того, какие именно матричные элементы $\langle \alpha | U | \nu \rangle$ определяют главный вклад в рассматриваемые транспортные характеристики рассеяния. Состояние $|\nu\rangle$ — здесь по-прежнему «невозмущенная» волновая функция (5.9), а в качестве состояния $\langle \alpha |$ подразумевается, вообще говоря, точная функция непрерывного спектра Φ_{α} в потенциале U , отвечающая энергии $\hbar\Omega_z/2 + \epsilon$. Борновское приближение справедливо строго, если в области значений r , существенных для вычисления характерных матричных элементов, можно считать, что $\Phi_{\alpha} \approx \Psi_{\alpha}$. В то же время часто (например, в задаче о рассеянии на заряженных примесях при условии, что $a_B \lesssim \lambda$, см. [2]) это условие нарушается, хотя в характерной области все-таки имеет место соотношение $\Phi_{\alpha} \sim \Psi_{\alpha}$. Тогда борновское

приближение дает полуколичественный ответ [2] и остается пригодным для оценок. При расчете поперечной проводимости в нашем случае имеет место именно такая ситуация. Действительно, мы видели, что в результате приведения к безразмерному виду функция (5.33) оказывается порядка единицы, если $\mathcal{D} \sim 1$. Это значит, что область взаимодействия электрона с примесным центром, дающая главный вклад в ответ, оказывается порядка λ , а характерный потенциал рассеяния (5.5) порядка $\hbar\Omega$. Отсюда волновая функция электрона в области взаимодействия искажается, но остается по порядку величины той же, что и невозмущенная. Если же \mathcal{D} существенно меньше единицы, то наш ответ является вполне строгим в смысле применимости борновского приближения. В любом случае он отражает функциональную зависимость поперечной проводимости от магнитного поля.

Теперь обсудим расчет частоты столкновений (5.15) и продольной проводимости. Здесь в окрестности резонанса имеет место строгое выполнение условий применимости борновского приближения. Удобно для оценки Φ_α воспользоваться точным уравнением

$$\Phi_\alpha(\mathbf{r}) = \Psi_\alpha(\mathbf{r}) + \int \mathcal{G}(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \Phi_\alpha(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (\text{П.3.1})$$

(см.; например, [55]). В нашем случае квантующего магнитного поля функция Грина $\mathcal{G}(\epsilon, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ почти не зависит от z и z' , максимальна при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/B \lesssim \lambda$ и быстро, как квадратичная экспонента, убывает вне этой области. В максимуме функция \mathcal{G} по порядку величины равна $1/\lambda^3 \sqrt{\epsilon \hbar \Omega}$, поэтому поправка к Ψ_α оказывается порядка $U(\mathbf{r})/\sqrt{\epsilon \hbar \Omega}$. При расчете τ^{-1} , как мы видели, характерное значение U определяется расстоянием $r \sim x \sim \lambda \sqrt{\hbar \Omega / \delta E}$, что позволило обрезать расходящийся при малых v интеграл (5.21). Отсюда имеем характерное значение $U(\mathbf{r}) \sim \hbar \Omega \lambda^2 / r^2 \sim \delta E$. Считая что, $\delta E \sim \epsilon$, получаем малую по параметру $\sqrt{\epsilon / \hbar \Omega}$ поправку к волновой функции в области взаимодействия.

Литература

1. V. F. Gantmakher, V. N. Zverev, in: *Landau Level Spectroscopy*, ed. by G. Landwehr and E. I. Rashba, North-Holland (1991), p. 1135.
2. В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984).
3. L. Eaves and J. C. Portal, *J. Phys. C* **12**, 2809 (1979).
4. В. Ф. Гантмахер, В. Н. Зверев, *ЖЭТФ* **69**, 695 (1975).
5. В. Н. Зверев, Д. В. Шовкун, *ЖЭТФ* **87**, 1745 (1984); *ФТТ* **26**, 356 (1984).
6. K. Von Klitzing and J. Tüchendorf, *Physics in High Magnetic Fields*, ed. by S. Chikazumi and N. Miura, Springer Ser. in Solid State Phys. **24** (1981), p. 139.
7. В. Л. Гуревич, Письма в *ЖЭТФ* **5**, 260 (1967).
8. С. М. Дикман, Д. И. Сидельников, Письма в *ЖЭТФ* **53**, 600 (1991).
9. S. M. Dickmann and D. I. Sidel'nikov, *Phys. Lett. A* **187**, 79 (1994).
10. B. Pajot, F. Merlet, and G. Taravella, *Can. J. Phys.* **50**, 2186 (1972).
11. Y. M. Mu, J. P. Peng, P. L. Liu, S. C. Shen, and J. P. Zhu, *Phys. Rev. B* **48**, 10864 (1993).
12. S. C. Shen, *Sol. St. Comm.* **93**, 357 (1995).
13. Е. М. Гершензон, Г. Н. Гольцман, А. И. Елантьев, *ЖЭТФ* **72**, 1062 (1977).
14. B. Pajot, F. Merlet, G. Taravella, and Ph. Arcas, *Can. J. Phys.* **50**, 1106 (1972).

15. N. Lee, D. M. Larsen, and B. Lax, J. Phys. Chem. Sol. **34**, 1817 (1973).
16. N. Lee, D. M. Larsen, and B. Lax, J. Phys. Chem. Sol. **35**, 401 (1974).
17. D. Cabib, E. Fabio, and G. Fiorio, Nuovo Cimento B **10**, 185 (1972).
18. M. S. Kashiev, S. I. Vinitisky, and F. R. Vukajlovic, Phys. Rev. A **22**, 557 (1980).
19. J. M. Wadehra, Astrophys. J. **248**, 874 (1981).
20. А. В. Турбинер, УФН **144**, 35 (1984).
21. А. В. Турбинер, ЯФ **46**, 204 (1987).
22. A. V. Turbiner, J. Phys. A **17**, 859 (1984).
23. R. J. Elliott and R. Loudon, J. Phys. Chem. Sol. **8**, 382 (1959); **15**, 196 (1960).
24. W. Rösner, H. Herold, H. Ruder, and G. Wunner, Phys. Rev. A **28**, 2071 (1983).
25. G. Wunner, W. Rösner, H. Ruder, and H. Herold, Astrophys. J. **262**, 407 (1982).
26. W. Rösner, G. Wunner, H. Herold, and H. Ruder, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17**, 29 (1984).
27. H. Forster, W. Strupat, W. Rösner, G. Wunner, H. Ruder, and H. Herold, J. Phys. B **17**, 29 (1984).
28. M. V. Ivanov, J. Phys. B **17**, 29 (1984).
29. Yu. P. Kravchenko, M. A. Liberman, and B. Johansson, Phys. Rev. A **53**, 287 (1996); Phys. Rev. Lett. **77**, 619 (1996).
30. W. Kohn and J. M. Luttinger, Phys. Rev. **97**, 883 (1955); **98**, 915 (1955).
31. R. A. Faulkner, Phys. Rev. **184**, 713 (1969).
32. J. Broeckz, P. Claws, and J. Vennik, J. Phys. C **19**, 511 (1986).
33. И. Л. Бейнихес, Ш. М. Коган, ЖЭТФ **93**, 285 (1987).
34. V. I. Galiev, A. F. Polupanov, and I. E. Shparlinski, J. Comput. Appl. Math. **39**, 151 (1992).
35. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979), § 90.
36. S. Titeica, Ann. der Phys. **22**, 128 (1935).
37. Б. И. Давыдов, И. Я. Померанчук, ЖЭТФ **9**, 1294 (1939).
38. E. Adams and T. Holstein. J. Phys. Chem. Sol. **10**, 254 (1959).
39. C. Erginsoy, Phys. Rev. **79**, 1013 (1950).
40. *Landolt-Börnstein*, Vol. 17a, Springer-Verlag, Berlin (1982). *Landolt-Börnstein*, Vol. 22a, Springer-Verlag, Berlin (1987).
41. И. Л. Бейнихес, Ш. М. Коган, Письма в ЖЭТФ **44**, 39 (1986).
42. K. V. Rao and A. Smakula, J. Appl. Phys. **37**, 2840 (1966).
43. N. Lee, D. M. Larsen, and B. Lax, J. Phys. Chem. Sol. **34**, 1059 (1973).
44. М. М. Вайнберг, *Вариационный метод и метод монотонных операторов в теории нелинейных уравнений*, Наука, Москва (1972).
45. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972).
46. A. K. Ramdas and S. Rodríguez, Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981).
47. C. Jagarmath, Z. W. Grabowski, and A. K. Ramdas, Phys. Rev. B **24**, 2082 (1981).
48. C. Jacoboni, C. Canali, G. Ottaviani, and A. Quaranta, Sol. St. Electron. **20**, 77 (1977).
49. C. Jacoboni, F. Nava, C. Canali, and G. Ottaviani, Phys. Rev. B **24**, 1014 (1981).
50. H. Kobori, T. Ohyama, E. Otsuka, J. Phys. Soc. Jap. **59**, 2164 (1990).
51. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974), §§ 133–135.
52. С. П. Андреев, ЖЭТФ **77**, 1046 (1979).
53. С. П. Андреев, УФН **143**, 213 (1984).
54. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, Наука, Москва (1983).
55. В. Г. Скобов, ЖЭТФ **37**, 1467 (1959).