

На правах рукописи

ПАВЛОВА Татьяна Витальевна

МАГНИТОПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦЫ
В СТРУКТУРАХ РАЗЛИЧНОЙ РАЗМЕРНОСТИ И ИХ РОЛЬ
В КИНЕТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЯХ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Специальность — 01.04.02 — теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Автор:

Москва — 2006

Работа выполнена в Московском инженерно-физическом институте (государственном университете) на кафедре теоретической ядерной физики.

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор
Андреев Сергей Павлович.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
Лисица Валерий Степанович,

доктор физико-математических наук, профессор
Менушенков Алексей Павлович.

Ведущая организация

Институт химической физики Российской академии наук.

Защита состоится 28 марта 2007 года в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 212. 130. 06. в Московском инженерно-физическом институте (государственном университете) по адресу: 115409, Москва, Каширское шоссе 31, конференц-зал главного корпуса.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МИФИ.

Автореферат разослан « » 2007 года.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук, профессор

Кельнер С.Р.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность.

Диссертация посвящена теоретическому исследованию магнитопримесных¹ (МП) состояний, а также кинетических явлений, определяемых рассеянием носителей на таких состояниях в полупроводниках различной структуры и размерности. МП состояния в целом ряде случаев оказывают определяющее влияние на кинетические коэффициенты полупроводников, легированных нейтральными примесями малого радиуса и помещенных в квантующие магнитные поля. Именно особенности спектра МП состояний обуславливают электрические, оптические и другие свойства как объемных, так и двумерных полупроводников, используемых в современной нано- и оптоэлектронике. До настоящего момента изучение МП состояний (их энергетического спектра, волновых функций связанных и квазисвязанных МП состояний, а также волновых функций задачи рассеяния электрона на МП состояниях) в основном проводилось в объемных полупроводниках и структурах с изотропным энергетическим спектром носителей и в плане изучения кинетики носителей на МП состояниях было фактически ограничено малыми глубинами примесного потенциала. Таким образом, актуальность проведенных в диссертации исследований определяется необходимостью как изучения МП состояний на центрах произвольной глубины в структурах различной размерности с изотропной и анизотропной эффективной массой носителей, так и анализа роли таких состояний в кинетике низкотемпературных явлений в полупроводниках.

Цель работы.

Целью настоящей диссертации явилось:

1) исследование магнитопримесных состояний электрона на центрах малого радиуса произвольной глубины в объемных и двумерных полупроводниках как с изотропным, так и с анизотропным энергетическим спектром носите-

¹Магнитопримесными называются состояния, образующиеся на центре притяжения при включении магнитного поля.

лей;

2) теоретическое изучение кинетических коэффициентов в полупроводниках с изотропной и анизотропной эффективной массой электронов, обусловленных рассеянием носителей на МП состояниях.

Научная новизна.

В диссертации впервые получены следующие результаты. Найдены точные волновые функции задачи рассеяния электрона с любой проекцией момента в зоне Ландау $N \ll (l_H/r_c)^2$ на короткодействующем ($r_c \ll l_H$, l_H — магнитная длина, r_c — радиус действия потенциала центра) центральном потенциале притяжения произвольной глубины в магнитном поле. Полученные функции позволили вычислить полуширину линии квантового циклотронного резонанса (КЦР), диффузию и проводимость при рассеянии носителей на нейтральных примесях малого радиуса, без ограничения на глубину примесного потенциала. Впервые получено хорошее качественное и количественное согласие с экспериментом по КЦР на нейтральных примесях в GaAs для полуширины резонансной кривой в широком диапазоне температур, напряженностей магнитного поля и концентраций примесей. Найдена точная зависимость коэффициента диффузии от энергии носителей, определяемая рассеянием электронов на МП состояниях и справедливая при произвольных значениях глубины примесного потенциала и напряженности магнитного поля. Для полупроводников с резко анизотропной эффективной массой носителей рассчитаны МП осцилляции продольной и поперечной проводимости в квантующем магнитном поле. Показано, что отсутствие сферической симметрии примесного потенциала, обусловленное анизотропией эффективной массы электронов, приводит к нестандартным осцилляциям проводимости по магнитному полю $\sim H^{1/4}$. Развита теория магнитопримесных состояний электрона на короткодействующих центрах в двумерных структурах. Анализ полученных уравнений спектра позволил найти все основные зависимости

энергий МП уровней от напряженности магнитного поля, номера зоны Ландау, проекции момента, длины рассеяния примесного потенциала и толщины двумерной структуры. Обнаружены и исследованы особенности спектра МП состояний в областях энергий, близких к энергиям квантово-размерных уровней. Это приводит, как впервые показано в диссертации, к расщеплению магнитопримесных уровней, сравнимому по величине с глубиной их залегания. Найденное расщепление должно проявляться в кинетических явлениях в двумерных полупроводниках, например, в тонкой структуре линии поглощения КЦР. Изучено основное состояние водородоподобной примеси в случае анизотропной эффективной массы носителей в двумерных полупроводниковых структурах. Это позволило исследовать деформацию примесного атома под влиянием как анизотропии эффективной массы электрона, так и границ двумерного слоя. Указанная деформация приводит к тому, что потенциал центра становится несферическим и дальнедействующим. В таких структурах зависимость кинетических коэффициентов от напряженности магнитного поля существенно отличается от таковой в объемных полупроводниках с изотропной эффективной массой носителей.

Практическая и научная ценность.

Проведенные в диссертации исследования имеют общетеоретическое значение, т.к. углубляют представления об атомах и отрицательных ионах в сильных полях. Полученные в диссертации результаты необходимы при обработке экспериментов по низкотемпературным явлениям переноса в полупроводниках различной зонной структуры и размерности. Они позволяют проводить расчеты кинетических коэффициентов в двумерных и объемных полупроводниках как с изотропной, так и с анизотропной эффективной массой электронов, определяемых рассеянием носителей на нейтральных центрах в квантующих магнитных полях. Температурно-полевые зависимости полуширины резонансной кривой, проводимости и коэффициента диффузии несут непо-

средственную информацию об энергетическом спектре примесей в полупроводниках в квантующих магнитных полях.

Теоретическая информация об энергетическом спектре МП состояний в двумерных структурах может быть использована при создании приборов на основе полупроводниковых гетероструктур, работающих в квантующих магнитных полях.

Работа выполнена на кафедре теоретической ядерной физики Московского инженерно-физического института (государственного университета). Результаты диссертационной работы могут быть использованы в научно-исследовательских центрах и лабораториях, ведущих теоретические и экспериментальные исследования по физике элементарных процессов в веществе, кинетике низкотемпературных явлений и физике твердого тела (ПРФЛ МПГУ, МИФИ, ФИ РАН, Лаборатории элементарных процессов и физико-химической кинетики ИХФ РАН, ИТФ РАН, ИФТТ РАН, Институте спектроскопии РАН) для решения как научных так и прикладных задач.

На защиту выносятся:

1. Исследование кинетических коэффициентов (полуширины линии поглощения КЦР, проводимости и коэффициента диффузии) в объемных полупроводниках в квантующих магнитных полях, определяемых рассеянием носителей на нейтральных центрах малого радиуса, проведенное в широком диапазоне напряженностей магнитного поля, температур и при произвольных значениях глубин примесного потенциала.

2. Изучение МП осцилляций продольной и поперечной проводимости в полупроводниках, обусловленных рассеянием носителей с резко анизотропным энергетическим спектром на МП состояниях, проведенное с учетом несферичности потенциала примеси.

3. Исследование МП состояний на центре малого радиуса в двумерной структуре с изотропной эффективной массой электронов.

4. Исследование состояний отрицательных ионов в двумерных структурах с анизотропным энергетическим спектром носителей.

Аппробация работы.

Результаты диссертации докладывались и обсуждались на конференциях: Одиннадцатой Международной конференции по лазерной физике (Братислава, 2002 г.), Двенадцатой Международной конференции по лазерной физике (Гамбург, 2003 г.), Тринадцатой Международной конференции по лазерной физике (Триест, 2004 г.), Двадцатой общей конференции по физике твердого тела (Прага, 2004 г.), Четырнадцатой Международной конференции по лазерной физике (Киото, 2005 г.), Научной сессии МИФИ-2005 (Москва, 2005 г.), Второй Научной летней школе Династия (Московская обл., 2005 г.), Четвертой научно-технической конференции Молодежь в науке (Саров, 2005 г.), Научной сессии МИФИ-2006 (Москва, 2006 г.), Пятнадцатой Международной конференции по лазерной физике (Лозанна, 2006 г.).

Публикации.

По результатам диссертации опубликовано 17 печатных работ.

Объем и структура диссертации.

Диссертация состоит из списка обозначений, введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы из 94 наименований. Работа изложена на 139 страницах машинописного текста, содержит 25 рисунков и 4 таблицы.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Необходимость исследования взаимодействия электрона с примесным центром в магнитном поле возникает при изучении квантовомеханической системы — отрицательный ион в магнитном поле, и при исследовании кинетических свойств примесных полупроводников в квантующих магнитных полях. В диссертации рассмотрены МП состояния в четырех типах структур: в объемных и двумерных полупроводниках с изотропной и анизотропной эффек-

тивной массой носителей.²

Для объемных полупроводников построена система волновых функций задачи рассеяния электрона с изотропной эффективной массой на центре малого радиуса. Алгоритм нахождения волновых функций следующий. Поскольку внешнее магнитное поле является слабым в области действия центра притяжения $r \lesssim r_c$, это позволяет представить волновую функцию при $r \lesssim r_c$ как решение уравнения Шредингера частицы в потенциале центра без поля, которое удовлетворяет обычным условиям конечности в начале координат и содержит энергию как неизвестный параметр. В области $r \gg r_c$ можно не учитывать влияние потенциала центра, и задача допускает точное решение. При подстановке решений в правую и левую части интегрального уравнения для волновой функции с последующим переходом к пределу при $r \rightarrow 0$, приходим к уравнению, определяющему спектр связанных и квазисвязанных состояний. Волновые функции определяются интегральным уравнением, в правой части которого под знаком интеграла стоит короткодействующий потенциал центра и найденная функция на расстояниях $r \lesssim r_c$. Полюса амплитуды рассеяния полученных таким образом функций дают правильные значения энергии МП и собственных состояний электрона для всех допустимых значений напряженности магнитного поля H и глубины примесного потенциала U .

Система полученных волновых функций позволила впервые построить модельно-независимую теорию КЦР, диффузии и проводимости при рассеянии носителей на МП состояниях центров малого радиуса и произвольной глубины в квантующем магнитном поле ($T \ll \hbar\omega_H$, T — температура, ω_H — циклотронная частота).

В диссертации развита теория КЦР для газа невзаимодействующих между собой электронов, находящихся в скрещенных однородном квантующем

²В двумерных полупроводниках с анизотропным энергетическим спектром носителей изучены примесные состояния в отсутствие магнитного поля.

магнитном и слабом резонансном электрическом полях и в потенциале хаотически расположенных примесей малого радиуса ($r_c \ll l_H$). Получена система квантовых кинетических уравнений для одноэлектронной матрицы плотности и одноцентрового коррелятора. В отличие от других работ, в которых расщепление цепочки уравнений проводилось по константе взаимодействия электрона с центром, в диссертации расщепление цепочки проводилось по плотности центров n_i , благодаря чему удалось получить систему уравнений без использования теории возмущений по взаимодействию электрона с центром. При расчете одноцентрового коррелятора использованы полученные волновые функции задачи рассеяния электрона на центре малого радиуса и произвольной глубины. Вычисления проведены на основе градиентно-инвариантного подхода, предполагающего выбор в качестве независимых переменных, в вигнеровском представлении обычной матрицы плотности, координаты электрона и его кинематического импульса. С помощью найденной вигнеровской матрицы плотности было получено относительное поглощение и вычислена полуширина резонансной кривой³:

$$\delta\omega \simeq \frac{\sqrt{2}\pi n_i \hbar^2}{m^{*3/2} \sqrt{T}} \left(\left| \frac{\alpha}{1 - iK_0(T)\alpha} \right|^2 + \left| \frac{\alpha}{1 - iK_1(T)\alpha} \right|^2 \right),$$

$$K_0(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}} - \frac{i}{\sqrt{2(1-\varepsilon)}}, \quad K_1(\varepsilon) = K_0(\varepsilon) + \frac{1}{\sqrt{2(1+\varepsilon)}},$$

где m^* — эффективная масса носителей (которая в данной задаче предполагается изотропной), ε — безразмерная энергия продольного движения электрона (в единицах $\hbar\omega_H$), $\alpha = |a|/l_H$ — константа взаимодействия электрона с центром в магнитном поле, a — длина рассеяния электрона на потенциале примеси в отсутствии магнитного поля.

Полуширина линии КЦР оказалась пропорциональной произведению концентрации рассеивающих центров n_i на плотность начальных состояний электрона в нулевой зоне Ландау ($\sim T^{-1/2}$) и на сумму двух функций продольной

³Полуширина резонансной кривой является фундаментальной характеристикой КЦР, т.к. она несет информацию о свойствах полупроводников: эффективной массе, знаке и законе дисперсии носителей; их взаимодействии с колебаниями решетки и дефектами; типах и концентрации последних.

энергии. Знаменатели функций $|K_0|^2$ и $|K_1|^2$ определяют спектр МП состояний в нулевой и первой зоне Ландау соответственно, поэтому их можно трактовать как вероятности нахождения электронов в нулевой и первой зонах Ландау (это отвечает тому, что в квантующем магнитном поле электроны находятся в основном в нулевой зоне Ландау, а однородное электрическое поле перемешивает состояния электрона нулевой и первой зон Ландау). Из этого следует, что спектр МП состояний оказывает определяющее влияние на уширение линии поглощения КЦР.

На рис. 1 представлены результаты сравнения температурной и полевой зависимостей найденной полуширины линии КЦР с экспериментальными данными и с результатами других теоретических работ. Очевидно, что полученные в диссертации зависимости впервые позволили добиться не только хорошего качественного, но и количественного совпадения с экспериментом.⁴

В диссертации рассчитаны статические коэффициент диффузии и проводимость газа невзаимодействующих между собой электронов, рассеивающихся на хаотически расположенных нейтральных центрах в сильном магнитном поле $\hbar/\tau \ll E_{\parallel}$, (τ — время релаксации импульса электрона, E_{\parallel} — энергия движения носителей вдоль магнитного поля). Радиус действия потенциала центра предполагается малым по сравнению с магнитной длиной и средним расстоянием между рассеивателями. Ограничений на глубину потенциала примеси не накладывается, т.е. перемешивание уровней Ландау индивидуальным центром может быть сколь угодно сильным. В диссертации вычисления выполнены на основе формулы Кубо, согласно которой диагональная часть тензора поперечной диффузии определяется миграцией центра циклотронного движения. Разложение коэффициента диффузии по плотности примесных атомов позволило провести вычисления с использованием волновых функций

⁴В экспериментах по изучению кинетических явлений в полупроводниках, определяемых рассеянием на МП состояниях, для создания сильного магнитного поля применяются инфракрасные (ИК) лазеры. В экспериментах, результаты которого представлены на графиках, в качестве источника электромагнитных волн использовались ИК лазеры с разрядной и оптической накачкой.

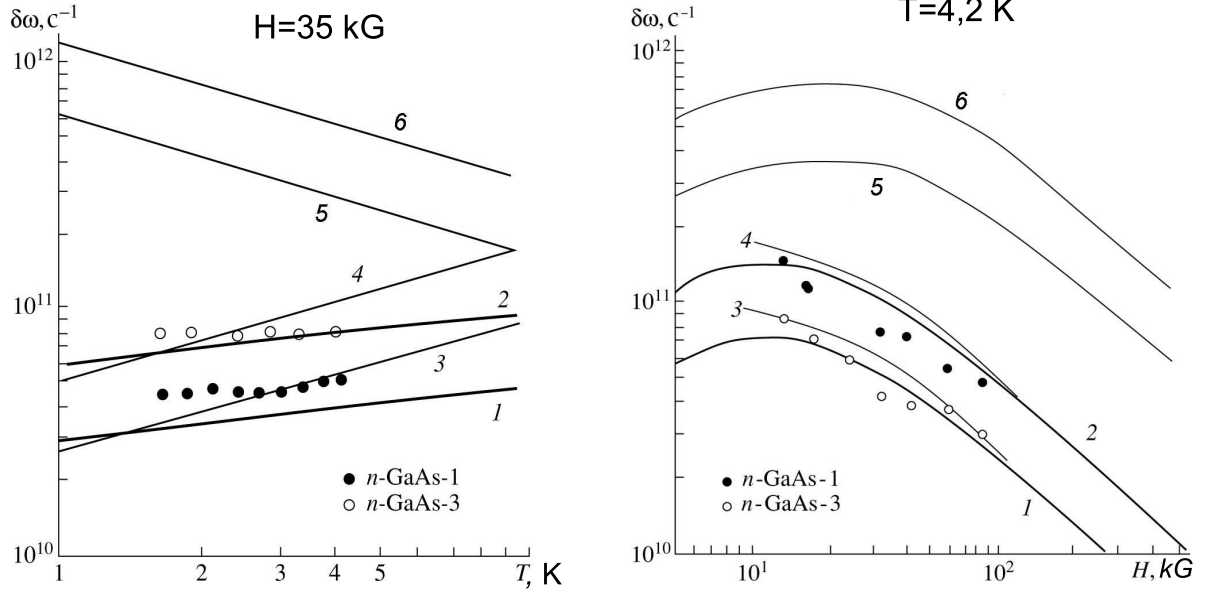


Рис. 1: Температурная и полевая зависимости полуширины линии КЦР, построенные по полученной формуле (кривые 1 и 2). Кривые 3 и 4 рассчитаны для мелкого потенциала примеси (Andreev A.S., Andreev S.P., Gurvich Yu.A., Laser Physics, 1997), кривые 5 и 6, а также отвечающие экспериментальным данным кружки и точки приведены в работе Kobori H., Ohyama T., Otsuka E., J. Phys. Soc. of Japan, 1990. Концентрация нейтральных примесей в n-GaAs-1 $n_i = 7,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (кривые 1, 3 и 5) в n-GaAs-3 $n_i = 15 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (кривые 2, 4 и 6).

одноцентровой задачи рассеяния электрона.

Найденный коэффициент поперечной диффузии

$$D_{\perp}(\varepsilon) = \frac{4\sqrt{2} \pi \hbar^2 l_H^2 n_i}{(m^*)^{3/2}} \frac{|M_{00}(\varepsilon)|^2}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad M_{00}(\varepsilon) = \frac{a/\sqrt{2}l_H}{1 + \frac{a}{\sqrt{2}l_H} \left[\frac{i}{\sqrt{\varepsilon}} + \zeta(1/2, 1 - \varepsilon) \right]}$$

пропорционален вероятности рассеяния электронов на индивидуальном центре в магнитном поле (которая $\sim |M_{00}|^2$), концентрации рассеивателей n_i и плотности состояний электрона ($\sim \varepsilon^{-1/2}$). Из полученной формулы следует, что при $\varepsilon \rightarrow 0$, $D_{\perp}(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon} \rightarrow 0$ и при $\varepsilon \rightarrow 1$, $D_{\perp}(\varepsilon) \sim (1 - \varepsilon)/\sqrt{\varepsilon} \rightarrow 0$, то есть когда полная энергия электрона совпадает с энергией уровней Ландау, диффузия электронов отсутствует.

Найденная формула позволяет описать основные зависимости коэффици-

ента поперечной диффузии от магнитного поля для различных глубин примесного потенциала (длин рассеяния). В слабом магнитном поле ($\alpha \ll 1$) при отрицательной длине рассеяния в примесном потенциале отсутствует собственное состояние, а под дном любой зоны Ландау имеется квазисвязанное (под дном зоны $N = 0$ — истинно связанное) МП состояние с энергией $\varepsilon = -\alpha^2/2$. При $\varepsilon = 1 - \alpha^2/2$ имеет место резонансное рассеяние электронов на МП состояниях, приводящее к резкому пику $D_{\perp}(\varepsilon)$, при этом полуширина резонансного пика имеет порядок $\delta\varepsilon \sim \alpha^2/2$. В слабом магнитном поле при положительной длине рассеяния под дном основной зоны имеется собственное связанное состояние электрона на центре, квазисвязанные МП уровни в верхних ($N \geq 1$) зонах Ландау отсутствуют. Резонансное рассеяние отсутствует и коэффициент диффузии не обнаруживает резонансного поведения. В сильном поле ($\alpha \gg 1$) возникает перестройка спектра, обусловленная резонансной ситуацией в яме без магнитного поля. При этом основное состояние имеет энергию $\varepsilon \simeq -0,3$ ниже дна зоны нуль, соответственно коэффициент диффузии имеет максимум при продольной энергии электрона $\varepsilon \simeq 0,7$.

Полученные результаты позволяют проводить анализ энергетического спектра нейтральной примеси по зависимости коэффициента диффузии от напряженности магнитного поля.

На основе найденной формулы для коэффициента диффузии с использованием соотношения Эйнштейна получена поперечная проводимость электронов в невырожденном полупроводнике в квантующем магнитном поле, обусловленная их рассеянием на короткодействующих центрах. Вычислена статическая поперечная проводимость невырожденного электронного газа. Полученное выражение для поперечной проводимости пропорционально интегралу по энергии от произведения произвольной функции распределения электронов по продольной энергии, плотностей начальных и конечных состояний электрона ($\sim \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$ — упругое рассеяние) и квадрата моду-

ля амплитуды его рассеяния на индивидуальном центре в магнитном поле ($\sim |M_{00}(\varepsilon)|^2$). Отметим, что расчет кинетических коэффициентов полупроводников в квантующих магнитных полях в борновском приближении по взаимодействию с примесями приводит к расходимостям⁵ при малых энергиях носителей, обусловленным большой плотностью состояний электрона ($\sim \varepsilon^{-1/2} \rightarrow \infty$ при $\varepsilon \rightarrow 0$). Благодаря использованию в вычислениях точных волновых функций, при малых продольных энергиях электрона $|M_{00}(\varepsilon)|^2 \sim \varepsilon$ и логарифмическая расходимость интеграла, возникающая в борновском приближении по взаимодействию носителей с рассеивающими центрами при $\varepsilon \rightarrow 0$, ликвидируется.

В Главе 2 диссертации рассмотрены продольная и поперечная проводимости в полупроводниках с резко анизотропным энергетическим спектром носителей, обусловленные рассеянием электронов на МП состояниях. Резкая анизотропия эффективной массы электрона $m^* = (m_{\perp}, m_{\perp}, m_{\parallel})$ (характерная для полупроводников IV группы) радикальным образом меняет характер МП состояний на нейтральных центрах. При ориентации \vec{H} вдоль тяжелой массы m_{\parallel} ($m_{\parallel} \gg m_{\perp}$), одномерный потенциал, в котором движется электрон,⁶ оказывается глубоким. За счет тяжелой продольной массы характерная энергия квантования в одномерной потенциальной яме меньше, чем при изотропной массе, поэтому в потенциале центра находится несколько МП уровней (в отличие от одномерного потенциала примеси в полупроводниках с изотропной массой, в котором существует лишь одно состояние). Кроме того, потенциал мелких примесей вследствие деформации волновой функции примесного электрона оказывается несферическим и дальнедействующим, причем ради-

⁵Выход за рамки борновского приближения при рассмотрении задачи рассеяния электрона на центре малого радиуса в магнитном поле автоматически приводит к устранению указанных расходимостей, как было впервые показано Скобовым для поперечной проводимости. Однако, использованный Скобовым при расчете проводимости алгоритм вычисления волновых функций не совсем корректен. Проведенное сравнение с результатами настоящей работы показало, что полученный таким образом коэффициент диффузии (это фактически проводимость неусредненная по начальным энергиям электронов) не имеет резонансного поведения в сильном поле и дает в два раза меньшее значение при наличии собственного уровня в яме.

⁶получающийся в результате усреднения потенциала примеси по волновым функциям поперечного движения электрона в магнитном поле

ус его спадания и глубина определяются магнитным полем. При уменьшении H МП уровни переходят в континуум с периодом $H^{1/4}$, при этом когда МП уровень пересекает границу континуума одномерная яма становится или прозрачной или абсолютно непроницаемой (в зависимости от четности МП уровня). Это приводит к осцилляциям кинетических коэффициентов полупроводника в квантующем магнитном поле, периодичным по магнитному полю как $H^{1/4}$. В частности, такие осцилляции имеет проводимость, что подтверждено в диссертации непосредственным расчетом.

Для газа невзаимодействующих между собой электронов с сильно сжатыми изоэнергетическими поверхностями (в конфигурации $\vec{H} \parallel m_{\parallel}$), рассеивающихся в квантующем магнитном поле на мелких нейтральных донорах, в диссертации вычислены поперечная и продольная статические проводимости.⁷ Обнаружены осцилляции как продольной, так и поперечной проводимости при изменении магнитного поля, периодичные по $H^{1/4}$. На основе полученных формул исследованы температурно-полевые зависимости МП осцилляций проводимости в слабом и сильном магнитных полях при высоких и низких температурах. Наиболее ярко осцилляции выражены в сильном магнитном поле при низких температурах, поскольку резонансное рассеяние электрона на слабосвязанном состоянии имеет место лишь в ситуации, когда его продольная энергия ($E_{\parallel} \sim T$) мала по сравнению с характерным расстоянием между соседними уровнями энергии продольного движения. Максимальное и минимальное значения поперечной проводимости непосредственно связаны с четностью МП уровня, переходящего в континуум при уменьшении напряженности магнитного поля. Минимум и максимум поперечной проводимости отвечают переходу в континуум нечетного и четного МП уровней соответственно. При этом коэффициент прохождения электрона через одномерный потенциал в обоих случаях равен единице, а коэффициент отражения

⁷Для упрощения окончательных формул мы ограничили рассмотрение задачи однодолинной моделью. Подобная ситуация может быть реализована методом одноосного сжатия полупроводника.

равен нулю. Поскольку продольная проводимость обратно пропорциональна коэффициенту отражения, то оказывается что она не зависит от четности МП уровня и при переходе в континуум как четного, так и нечетного МП уровней, достигает своих наибольших значений.

Следующий круг вопросов, впервые изученных в диссертации, связан с нахождением МП состояний электрона в двумерных полупроводниках. В Главе 3 методом потенциала нулевого радиуса⁸ найдено уравнение для энергии основного состояния отрицательного иона, находящегося в магнитном поле в двумерной структуре:

$$\frac{l_H}{a} = -\frac{\zeta(1/2, -\varepsilon)}{\sqrt{2}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{n-\varepsilon} (1 + e^{\sqrt{2(n-\varepsilon)} L/l_H})},$$

где L — толщина структуры, $\zeta(1/2, -\varepsilon)$ — обобщенная ζ -функция Римана. Полученное уравнение справедливо для примесного потенциала произвольной глубины, при сколь угодно сильном перемешивании уровней Ландау центром. Из полученного уравнения спектра найден критерий возникновения связанных МП состояний в двумерных структурах. В отличие от трехмерной задачи, в которой при $a < 0$ всегда есть связанное МП состояние электрона на центре, в двумерном случае такое состояние существует только в достаточно широком слое.

Уравнение спектра позволило найти все основные зависимости энергии примесного состояния в двумерном полупроводнике от магнитного поля, длины рассеяния и толщины слоя. В слабом магнитном поле ($\alpha \ll 1$) при $a < 0$ (т.е. когда в потенциале центра в отсутствии магнитного поля уровня нет) в предельном случае широкой ямы $L/l_H \gg 1$ энергия МП уровня равна:

$$\varepsilon = -\frac{a^2}{2l_H^2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}a}{l_H} [\zeta(1/2) - e^{-\sqrt{2}L/l_H}] \right) \left(1 - 4e^{-|a|L/l_H^2} \right).$$

Первая скобка определяет перенормировку длины рассеяния. Экспоненциально малая по $|a|L/l_H^2$ поправка к энергии во второй скобке обусловлена

⁸развитого Демковым Ю.Н. и Друкаревым Г.Ф.

ограничением движения электрона в направлении, перпендикулярном поверхности слоя и пропорциональна вероятности обнаружить частицу у стенки бесконечно глубокой ямы. Наличие границ слоя и влияние верхних зон Ландау дают отрицательные поправки к антидиамагнитному сдвигу энергии трехмерной задачи, уменьшая его величину.

В случае $a > 0$ в слабом поле в потенциале центра находится собственный уровень, который залегает глубоко ($|\varepsilon| \gg 1$). Энергия связи оказывается квадратичной по магнитному полю (как и в трехмерном случае), и по аналогии с трехмерным случаем такая зависимость приводит к диамагнетизму. Экспоненциально малая поправка $\sim e^{-L/a}$ к диамагнитному сдвигу энергии, уменьшающая его величину, обусловлена наличием границ слоя и обращением волновой функции электрона на них в нуль. Даже в случае узкой ямы ($L/l_H \ll 1$) зависимость энергии связи от магнитного поля оказывается квадратичной, поскольку собственный уровень слабо чувствителен к изменению магнитного поля и толщины слоя.

В сильном поле ($\alpha \gg 1$), при резонансной ситуации в яме (т.е. когда в потенциале центра без магнитного поля уровня нет, но он появляется при сколь угодно малом увеличении глубины потенциала) при уменьшении толщины слоя уровень выталкивается в сплошной спектр. Таким образом в случае узкой ямы и сильного поля связанное состояние в потенциале центра с $a > 0$ отсутствует. В потенциале с $a < 0$ связанное состояние в сильном поле существует. При возникновении МП уровень сдвиг энергии от границы сплошного спектра вниз пропорционален $1/H$. Качественно иное поведение связанного состояния при изменении магнитного поля по сравнению с трехмерным случаем обусловлено эффектом размерного квантования энергии электрона вдоль H (в объемном полупроводнике связанное состояние при $a < 0$ существует всегда, и сдвиг его энергии от границы сплошного спектра вниз квадратичен по полю).

Спектр связанных состояний электрона с произвольной проекцией момента в зоне Ландау $0 \leq N < l_H^2/r_c^2$ в короткодействующем потенциале центра с длиной рассеяния $a < 0$, $|a| \ll l_H$ получен в приближении слабого перемешивания уровней Ландау центром⁹. В рамках этого приближения изучено влияние верхних зон на МП состояния электрона. Проведен анализ зависимости энергии МП уровней от положения центра в слое. В случае сильного перемешивания двух зон Ландау обнаружено специфическое поведение МП уровней, в частности, при пересечении МП уровня квантово-размерными (ямными) уровнями нижележащих зон Ландау, возникает расщепление МП уровня. Если энергия четного ямного уровня оказывается близкой к энергии примесного уровня, величина расщепления $\Delta\varepsilon$ сравнима с глубиной залегания примесного уровня под дном зоны Ландау. При переходе к бесконечно широкому слою ($L \rightarrow \infty$) найденное расщепление исчезает по закону $\Delta\varepsilon \sim \sqrt{l_H/\alpha L}$. При совпадении энергии МП уровня с энергией нечетных ямных уровней нижележащих зон Ландау расщепления не возникает, поскольку МП (четный) уровень с нечетными ямными уровнями не взаимодействует. Отметим, что в высших зонах Ландау количество ямных уровней, одновременно взаимодействующих с примесью, пропорционально \sqrt{N} , и в трехмерной задаче этому соответствует ширина МП уровня, также пропорциональная \sqrt{N} .

Вычисленная энергия связи D^- центра в слое толщиной 20 нм в магнитном поле $9 \cdot 10^4$ Гс составила 4,6 меВ, что согласуется с экспериментальным значением $4,45 \pm 0,25$ меВ.

Последний круг вопросов, впервые рассмотренных в диссертации, касается влияния анизотропии энергетического спектра носителей и границ слоя на примесный атом (в конфигурации, когда направление тяжелой массы перпендикулярно поверхности слоя $m_{\parallel} \perp \rho$, а примесный атом расположен в точке $(0, z_i)$). В Главе 4 вариационным методом изучен водородоподобный

⁹в этом приближении при проведении вычислений справедливо ограничиться учетом всех нижних и одной верхней зоны Ландау

примесный атом в отсутствие магнитного поля в двумерном полупроводнике с анизотропной эффективной массой электронов. При расчете использована двухпараметрическая пробная волновая функция трехмерной задачи с модулирующим множителем, учитывающим наличие бесконечного потенциала на границах полупроводника:

$$\Psi(\rho, z, \varphi; a_{\parallel}, a_{\perp}) = \cos(\pi z/L) \exp\left\{-\sqrt{\frac{\rho^2}{a_{\perp}^2} + \frac{(z - z_i)^2}{a_{\parallel}^2}}\right\}.$$

Вариационные параметры a_{\perp} и a_{\parallel} определяют характерные размеры электронного облака вдоль поперечной и продольной эффективной массы соответственно. Такой вид пробной функции позволил исследовать зависимость энергии основного состояния электрона от толщины слоя и параметра анизотропии эффективной массы m_{\perp}/m_{\parallel} . В трехмерном полупроводнике с анизотропным энергетическим спектром носителей примесный атом вытянут вдоль направления тяжелой массы m_{\parallel} . Наличие границ слоя приводит к сжатию электронного облака в направлении m_{\parallel} . Когда деформация примесного атома за счет анизотропии эффективной массы и вследствие наличия границ слоя уравниваются друг друга, примесный атом становится сферически симметричным. Для кремния это происходит при толщине слоя порядка боровского радиуса в кремнии, для германия — в более узких слоях из-за сильной анизотропии эффективной массы.

В диссертации вычислена энергия связи мелкой примеси в трех веществах с различными параметрами анизотропии эффективной массы: GaAs ($m_{\perp}/m_{\parallel} = 1$), Si ($m_{\perp}/m_{\parallel} = 0,2$) и Ge ($m_{\perp}/m_{\parallel} = 0,05$). Энергия связи мелкой примеси в Si превышает значения энергии связи для Ge и GaAs и обнаруживает более резкую зависимость от толщины слоя. Это объясняется тем, что у кремния значение поперечной эффективной массы примерно в 3 раза больше, чем у Ge и GaAs, из-за различного строения кристаллической решетки данных веществ. Полученные значения энергии связи E_b аппроксимируются экспо-

ненциальной зависимостью:

$$E_b = E_b^{3D} + B \exp(-\beta L/a_{\perp}^b),$$

где E_b^{3D} — энергия связи водородоподобного атома в объемном полупроводнике, $a_{\perp}^b = \frac{\hbar^2 \kappa}{e^2 m_{\perp}}$ — боровский радиус примесного атома в направлении m_{\perp} ; параметры B и β определяются строением кристаллической решетки данного полупроводника. В квантовой яме шириной $L > 20$ нм энергия связи электрона практически не зависит от толщины слоя и совпадает с теоретическими расчетами для объемных полупроводников. Результаты расчетов энергии связи мелкой примеси, находящейся по центру и на границе слоя при $L \gg a_{\perp}^b$ совпадают с экспериментальными данными для s- и p-состояний в объемных полупроводниках соответственно.

Основные результаты

1. Построена теория квантового циклотронного резонанса при рассеянии носителей на нейтральных примесях малого радиуса и произвольной глубины. На основе построенной теории получена формула, описывающая полуширину линии поглощения КЦР, справедливая в широком диапазоне напряженностей магнитного поля, температур и расстроек частоты. Впервые достигнуто не только хорошее качественное, но и количественное согласие с экспериментами по КЦР на нейтральных примесях в полупроводниках.

2. Вычислены коэффициент поперечной диффузии и статическая проводимость электронного газа в квантующих магнитных полях, обусловленные наличием МП состояний.

3. Развита теория магнитопримесных осцилляций статической проводимости в полупроводниках со сфероидальными изоэнергетическими поверхностями носителей. Исследованы осцилляции как продольной, так и поперечной проводимости, обусловленные анизотропией эффективной массы электронов, рассеивающихся на магнитопримесных состояниях.

4. Получен и исследован спектр магнитопримесных состояний электро-

на на центрах малого радиуса в двумерных полупроводниках. Обнаружено расщепление МП уровней при совпадении их энергии с четными квантово-размерными уровнями. Найден критерий существования МП уровней в потенциале центра в двумерной структуре.

5. Найдены волновая функция и энергия связи основного состояния водородоподобной примеси в двумерных полупроводниках с анизотропной эффективной массой носителей. Проанализировано совместное влияние анизотропии эффективной массы и толщины слоя на основное состояние водородоподобной примеси.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Magnetic-impurity conductivity oscillations in semiconductors with a sharply anisotropic effective mass of charge carriers, *Laser Phys.*, 11, 1357 (2001).

2. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Line broadening in quantum cyclotron resonance due to neutral impurities of arbitrary depth, *Laser Phys.*, 12, 1381 (2002).

3. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Quantum cyclotron resonance due to neutral impurities of arbitrary depth, *Laser Phys.*, 13, 897 (2003).

4. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Magnetic impurity particle states on the short-range potential of arbitrary depth, *Laser Phys.*, 14, 174 (2004).

5. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Hydrogenic impurity in two-dimensional semiconductors with anisotropic energy spectrum of carriers, *Laser Phys. Lett.*, 2, 608 (2005).

6. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Magnetic impurity states of electron in two-dimensional semiconductor structures, *Laser Phys.*, 16, 998 (2006).

7. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Particle in short-range potential in two-dimensional structure in magnetic field, *Laser Phys. Lett.*, 3, 319 (2006).

8. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Quantum Cyclotron Resonance due to Neutral Impurities of Arbitrary Depth, 11th International Laser Physics Workshop LPHYS'02, Bratislava, Book of Abstracts, 87 (2002).

9. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Magnetic Impurity Particle States on the Short-Range Potential of Arbitrary Depth, 12th International Laser Physics Workshop LPHYS'03, Hamburg, Book of Abstracts, 97 (2003).

10. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Magnetic Impurity Particle States on the Short-Range Potential in Two-Dimensional Structures, 13th International Laser Physics Workshop LPHYS'04, Trieste, Book of Abstracts, 99 (2004).

11. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, The Role of Magnetic Impurity States of Short-Range Potential in Conductivity of Electron Gas, 20th General Conference Condensed Matter Division EPS CMD20, Prague, Book of Abstracts, 111 (2004).

12. С.П. Андреев, Т.В. Павлова, Состояния электрона на нейтральной примеси в двумерных полупроводниках в квантующем магнитном поле, Сборник научных трудов Научная сессия МИФИ 2005, 5, 276 (2005).

13. S.P. Andreev, T.V. Pavlova, Hydrogenic impurity in two-dimensional semiconductors with anisotropic energy spectrum of carriers, 14th International Laser Physics Workshop LPHYS'05, Kyoto, Book of Abstracts, 179 (2005).

14. С.П. Андреев, Т.В. Павлова, Расчет энергии связи водородоподобной примеси в двумерных полупроводниках с анизотропным энергетическим спектром носителей, Сборник научных трудов IV научно-технической конференции Молодежь в науке, Саров (2005).

15. С.П. Андреев, Т.В. Павлова, Энергетический спектр магнитопримесных состояний электрона на D^0 центре в двумерной структуре, Сборник научных трудов IV научно-технической конференции Молодежь в науке, Саров (2005).

16. С.П. Андреев, Т.В. Павлова, Квантовый циклотронный резонанс на короткодействующих центрах произвольной глубины, Сборник научных трудов Научная сессия МИФИ 2006, 4, 197 (2006).

17. С.П. Андреев, Т.В. Павлова, Основное состояние D^- центра в двумерной структуре в магнитном поле, Сборник научных трудов Научная сессия МИФИ 2006, 5, 180 (2006).