

GaAs 中由磁场引起的与 Si 施主有关的高亚稳态

陈张海 陈忠辉 刘普霖 史国良 胡灿明 石晓红 沈学础

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室 上海 200083)

摘要 本文报道了 GaAs 中 Si 浅施主的傅里叶变换红外(FTIR)磁光电导谱. 观察到非零磁场下从类氢束缚基态到施主高亚稳态的跃迁. 采用变分方法计算了跃迁能量以及这些高亚稳态的离化能的磁场关系, 并与实验结果进行了比较.

PACC: 7155, 7170, 7240

1 引言

在过去的几十年中, 人们对半导体中的类氢浅施主的磁场行为进行了广泛的研究^[1]. 许多基于有效质量近似的理论计算给出了与实验相当符合的结果^[2~5]. 然而, 由于磁场中浅杂质电子的哈密顿算符中既有球对称的库仑势, 还存在着磁场引入的柱对称项, 因此, 除了那些众所周知的以氢原子量子数 (n, l, m) 标识的束缚能级外, 施主电子的薛定谔方程还将存在另一套分立的解^[6]. 这些解是由各个朗道子能带派生出来的, 它们所对应的能级只能用高场量子数 (N, m, ν) 来标识, 其中 N 为朗道量子数, m 为磁量子数, 而 ν 则是该本征态对应的波函数在磁场方向的节点数目; 并且, 满足 $N > m, N > 0$ 以及 $\nu \geq 0$ 的条件. 这些附加的能态在能量上与量子数小于 N 的朗道子能带共振, 并且由于库仑势的存在而与这些较低的朗道子带耦合. 因此, 处在这样的分立能级上的电子并不是严格束缚的, 它们可以通过自离化(autoionizing)而无辐射地跃迁到较低的朗道子带上. 浅施主的这些共振态即是所谓的亚稳态或自离化态.

Klarenbosch 等人在 GaAs 中 Si 的远红外激光光电导光谱中观察到与上述亚稳态相对应的跃迁峰, 并对它们进行了详细的指认^[7~9]. 有关磁场下浅施主亚稳态的其他实验报道也主要集中在激光光电导光谱方面^[10], 而傅里叶变换光谱的实验结果则较少^[11], 主要原因可能是实验存在一定的难度. 并且, 由于施主亚稳态波函数较为复杂, 迄今为止, 实验结果与理论计算的比较, 尤其是涉及高亚稳态的情形, 还相当缺乏^[8,9]. 最近, Barmby 等人提出了亚稳态的一个简单的尝试波函数, 他们的理论计算结果与现有的关于较低能量的亚稳态的实

陈张海 男, 1969 年生, 半导体物理和半导体器件物理专业博士研究生
陈忠辉 男, 1969 年生, 半导体物理和半导体器件物理专业博士研究生
1996 年 9 月 23 日收到初稿, 1997 年 1 月 9 日收到修改稿

验数据相当符合^[12]. 在本文中,我们将报道 GaAs 中 Si 施主的远红外傅里叶变换光电导谱,对与亚稳态有关的谱峰进行了指认;同时,采用 Barmby 等人给出的尝试波函数进行变分计算,获得基态到各高亚稳态的跃迁能量以及这些亚稳态的离化能,并与实验结果进行了比较.

2 实验

本工作所采用的样品为 MBE 生长 GaAs 薄膜,厚度 $5\mu\text{m}$, Si 施主浓度为 10^{14}cm^{-3} , 衬底为半绝缘 GaAs. 欧姆电极用 In 在 450°C 下 N_2 和 H_2 混合气体保护下合金化获得. 由 Hall 效应测量得到 300K 时电子浓度和迁移率分别为 $8 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$, $6400\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$; 77K 下分别为 $7 \times 10^{14}\text{cm}^{-3}$, $69000\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$. 远红外光电导谱的测量在 Bruker IFS-113V 型 Fourier 变换光谱仪上进行. 样品置于 OXFORD 标准超导磁体的低温杜瓦内,利用低损耗的光学传输装置将远红外辐射从 Fourier 变换光谱仪引到置于磁体中的光导管中^[13],并在样品与光导管之间加一级聚光锥,使一部分的入射光倾斜照射到样品上,从而偏离严格的法拉第位形.

3 理论计算

我们的变分计算基于 Simola 等人提出的有关强磁场中氢原子能级的理论^[6],并采用具有如下形式的尝试波函数(柱坐标系中)^[12]:

$$\Psi_{Nmv}(\vec{r}) = \Phi_{Nm}(\rho, \varphi) z^v e^{-b_{Nm} z^2} \quad (1)$$

其中 $\Phi_{Nm}(\rho, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda^2}} e^{im\varphi} e^{-(1/2)\xi} \zeta^{(1/2)|m|} P_{Nm}(\zeta)$, 为朗道波函数; $\lambda = (\frac{\hbar}{eB})^{1/2}$, $\xi = \frac{\rho^2}{2\lambda^2}$ 以及 $P_{Nm}(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{N! s!}} \sum_{k=0}^{\min(N,s)} \frac{(-1)^k}{k!} \frac{N!}{(N-k)!} \frac{s!}{(s-k)!} \zeta^{\min(N,s)-k}$. 式(1)中的 $s \equiv N - m$, b_{Nm} 为变分参数. 亚稳态的能量可以通过求下式的极小值获得

$$E_{Nmv} = \frac{\langle \Psi_{Nmv} | \hat{H}_e | \Psi_{Nmv} \rangle}{\langle \Psi_{Nmv} | \Psi_{Nmv} \rangle} \\ = 2\beta(2N+1) + 3^v b_{Nm} - (4b_{Nm})^v \sqrt{\frac{8b_{Nm}}{\pi}} \int_0^\infty I_r^{NN} z^{2v} e^{-2b_{Nm} z^2} dz \quad (2)$$

上式中的 $\beta = \frac{e\hbar B}{4mR}$ 为无量纲的磁场量度; B 为磁感应强度; \hat{H}_e 为杂质电子的哈密顿,而

$$I_r^{NN} = 2\beta^{1/2} \int_0^\infty \frac{[P_{Nm}(\zeta)]^2 e^{-\xi|\zeta|^m}}{\sqrt{\zeta + (\beta^{1/2} z)^2}} d\zeta \quad (3)$$

为了求得从 1s 类氢束缚基态到亚稳态的跃迁能量,以及确定亚稳态离化能所需的基态和第 N 朗道子能带的能量间距,需要精确计算 1s 态的能量 E_{1s} . 然而,由于 1s 态上的电子处于紧束缚的状态,上述尝试波函数不适用于描述这样的低能束缚态,所给出的变分结果也不准确. 因此,我们直接引用 Makado 等人的采用有效质量近似计算得到的 1s 态能量的结果^[3].

由第 N 朗道子能带派生出来的施主亚稳态 (N, m, n) 的离化能可以由下式计算得到

$$E_N - E_{Nmv} = (E_N - E_{1s}) - (E_{Nmv} - E_{1s}) \quad (4)$$

其中 E_N 为第 N 朗道子带的能量; E_{Nmv} 为亚稳态能量. 上式右边的第一项可以由理论计算得到, 而第二项可以同时从理论上和实验上确定.

在理论计算过程中, 我们还考虑了能带非抛物性所引起的修正. 这样的修正可以由标准的 Kane 模型描述^[5,14]

$$E_{np} = \frac{E_g^*}{2} [-1 + (1 + 4 \frac{E_p}{E_g^*})^{1/2}] \quad (5)$$

式中 E_g^* 的为有效禁带宽度, 对于 GaAs 而言, $E_g^* \approx 0.9 \text{eV}$ ^[14]; E_{np} 和 E_p 分别为能带非抛物性修正后的能量和未修正的能量. 同时, 在计算中, 我们还考虑了极化子效应的一级修正, 即以 $m^* = m_0^* (1 + \frac{1}{6} \alpha)$ 代替原来的电子有效质量 m_0^* ^[15], α 为 Frohlich 极化子耦合系数.

4 结果与讨论

图 1 给出了样品在 4.2K 温度下磁场为 1.7T 时的 FTIR 光电导谱. 通过与变分计算结果以及现有的实验数据的比较^[3,5,7,8,11], 可以对

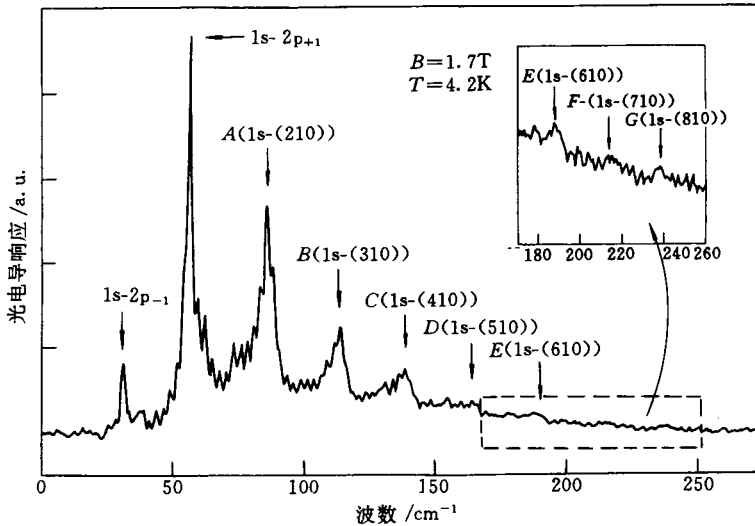


图 1 温度 4.2K 磁场 1.7T 时 GaAs 中 Si 施主的 FTIR 光电导谱

图中的各谱峰进行指认. 我们分别用氢原子量子数 (n, l, m) 和高场量子数 (N, m, ν) 对类氢束缚态和亚稳态进行标识, 以示区别. 图 1 中的 A、B、C、D、E、F、G 分别对应于 1s 束缚基态到亚稳态 (210)、(310)、(410)、(510)、(610)、(710)、(810) 的跃迁. 这些跃迁满足选择定则: $\Delta m = \pm 1, \pi, \pi_f = -1$. 其中, $\pi = (-1)^{m+\nu}$ 表示了初态(或末态)的宇称.

这些光电导峰表现出一定的非对称线型, 这起因于库仑势所引起的亚稳态与较低朗道连续态的耦合^[16].

在图 2 中, 我们同时给出了实验测得的 1s-(310)、1s-(410)、1s-(510)、1s-(610) 和 1s-(710) 跃迁能量的磁场关系以及它们所对应的变分计算结果. 从图中可以看出, 实验点在宽的能量范围内与理论曲线符合得很好, 而在靠近 GaAs 的剩余射线带 (reststrahlen band) 的能量区域, 实验点和理论值略有偏差 (对于 1s-(610) 和 1s-(710) 跃迁, 由于实验点较为稀疏, 这样的偏差并不明显), 这主要是因为我们在变分计算过程中并未考虑共振电子-声子相互作用的影响, 而只进行了非共振极化子效应的修正. 值得注意的是, 即使在低磁场下, 实验结果与理论计算也相当一致, 尤其是 1s-(310)、1s-(410)、1s-(510) 跃迁. 根据 Simola 等人的理

论,虽然在强场近似条件下,施主电子哈密顿中的库仑势可以被看成微扰,亚稳态(N, m, n)的波函数主要来自第 N 朗道子能带的贡献,并且可以写成式(1)所示的分离变量形式;但是,在弱磁场的情形下,库仑势不能再被当作微扰量,此时,将有更多的朗道子带对施主亚稳态产生贡献,式(1)所示的分离形式的尝试波函数不再适用. 尽管如此,采用此变分波函数的计算结果在低磁场下与实验点仍如此符合,目前这个原因还尚不清楚^[12].

根据公式(4),我们从理论上和实验上确定了(310)-(710)等亚稳态的离化能,结果如图 3 所示. 从图中可以看出,亚稳态的离化能随着朗道量子数 N 的增大而减小,但却随着磁场的增强而增大,这与 Simola 等人给出的磁场下氢原子能级示意图相一致^[6]. 很明显,图 3 中的理论曲线和实验值基本符合. 但在低磁场下,具有高朗道量子数的亚稳态(如(610)、(710)等),其离化能的实验数据和理论结果不是很好符合. 这主要因为在低磁场下,基态到这些高亚稳态的跃迁能量难于精确确定.

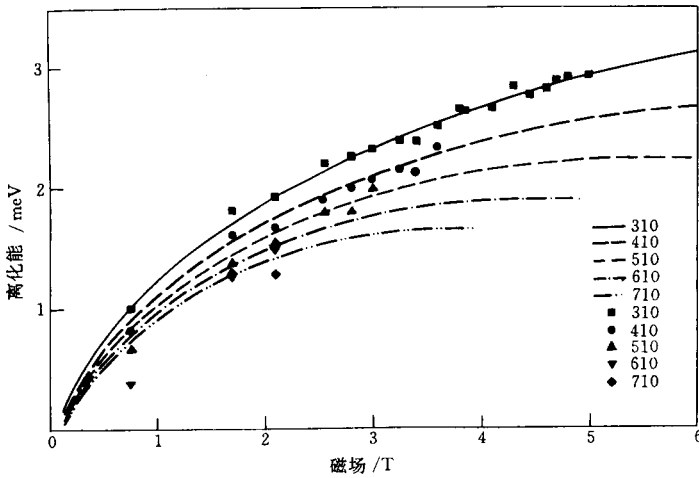


图 3 (310),(410),(510),(610)和(710)亚稳态离化能的磁场关系
曲线为理论计算结果

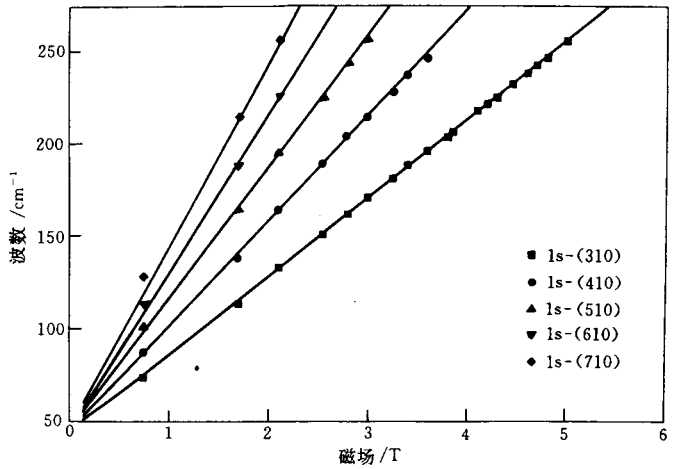


图 2 1s-(310),1s-(410),1s-(510),1s-(610)和 1s-(710)跃迁能量的磁场关系
实线为变分计算结果

图 3 中的理论曲线和实验值基本符合. 但在低磁场下,具有高朗道量子数的亚稳态(如(610)、(710)等),其离化能的实验数据和理论结果不是很好符合. 这主要因为在低磁场下,基态到这些高亚稳态的跃迁能量难于精确确定.

5 结束语

我们测量了 GaAs 中 Si 施主的傅里叶变换红外磁光电导谱,观察到从 1s 类氢束缚基态到一些高亚稳态的跃迁. 用变分方法计算了这些跃迁能量磁场关系,与实验结果进行了比较. 同时,从理论上和实验上确定了有关的高亚稳态的离化能.

参 考 文 献

- [1] A. K. Ramdas and S. Rodriguez, Rep. Prog. Phys., 1981, **44**: 1297.
 [2] D. M. Laren, Phys. Rev., 1973, **B8**: 535.
 [3] P. C. Makado and N. C. McGill, J. Phys., 1986, **C19**: 873.
 [4] J. L. Dunn and E. P. Pearl, J. Phys., 1991, **C3**: 8605.
 [5] J. M. Shi, F. M. Peeters and J. T. Devreese, Phys. Rev., 1993, **B48**: 5202.
 [6] J. Simola and J. Virtamo, J. Phys., 1978, **B11**: 3309.
 [7] A. V. Klarenbosch, J. Burghoorn, T. O. Klaassen *et al.*, Proc. Int. Conf. On Shallow Impurities in Semiconductors, Linköping, Sweden, Edited by B. Monemar, 277 (1988).
 [8] A. V. Klarenbosch, T. O. Klaassen, W. Th. Wenckebach *et al.* J. Appl. Phys., 1990, **67**: 6323.
 [9] A. V. Klarenbosch, K. K. Geerinck, T. O. Klaassen *et al.*, Europhys. Lett., 1990, **13**: 237.
 [10] C. J. Armistead, R. A. Stradling and Z. Wasilewski, Semicond. Sci. Technol., 1989, **4**: 557.
 [11] H. P. Wagner and W. Prettl, Solid State Commun., 1988, **66**: 367.
 [12] P. W. Barmby, J. L. Dunn, C. A. Bates *et al.*, J. Phys., 1994, **C6**: 7867.
 [13] P. L. Liu, G. L. Shi, P. G. Wang *et al.*, Chin. J. IR mm Waves, 1993, **12**: 307.
 [14] E. Batke, K. Bollweg, U. Merkt *et al.*, Phys. Rev., 1993, **B48**: 8761.
 [15] Polaron in Ionic Crystal and Polar Semiconductors, Edited by J. T. Devreese, North Holland Publishing Company, London (1972).
 [16] S. K. Bhattacharya and Shih-I Chu, J. Phys., 1985, **B18**: L275.

High-Index Metastable States of Si Donors in GaAs Under Magnetic Field

Chen Zhanghai, Chen Zhonghui, Liu Pulin, Shi Guoliang,
Hu Canming, Shi Xiaohong and Shen Xuechu

(National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,
The Chinese Academy Sciences, Shanghai 200083)

Received 23 September 1996, revised manuscript received 9 January 1997

Abstract Fourier transform infrared (FTIR) Photoconductivity (PC) spectra of Si donors in GaAs under magnetic field are presented. The transitions from hydrogen-like ground state to the high-index metastable states under non-zero magnetic field have been observed. The magnetic field dependence of these transition energies is compared with the variational calculations, and the ionization energies of the high-index metastable states are determined.

PACC: 7155, 7170, 7240