УДК 621.315.592

НЕЛИНЕЙНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ПРИМЕСНОГО ЦЕНТРА В ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Ю. П. Дрожжов

(кафедра физики полупроводников)

§ 1. **Введение.** Электромодуляционная спектроскопия широко используется для получения информации о свойствах системы примесных центров в полупроводниках. Зачастую, однако, интерпретация получаемых экспериментальных данных на основе имеющихся расчетов [1] оказывается затруднительной. Экспериментально было показано [2], что при исследовании электропоглощения на глубоких центрах, например в GaAs, основную роль играет электрооптический эффект, который не учитывался в расчетах коэффициента поглощения в электрическом поле. Настоящая работа призвана заполнить имеющийся пробел.

Как будет показано, при наличии в полупроводнике примесного центра (ε_0 — энергия ионизации в валентную (v) или зону проводимости (c)) квадратичный нелинейный коэффициент $\varkappa^{\gamma\alpha\beta}$ имеет вид:

$$\varkappa^{\gamma\alpha\beta}=\frac{\sqrt{2}\,e^3}{\pi\varepsilon_0^2}\sqrt{\frac{m_1m_2m_3}{m_0^3}}\,\frac{X^{\gamma\alpha\beta}}{\sqrt{\varepsilon_0-\hbar\omega}},\quad \hbar\omega<\varepsilon_0. \tag{1}$$

Здесь m_0 и e — масса и заряд электрона, m_1, m_2, m_3 — эффективные массы на дне зоны проводимости или валентной. Наличие расходимости в знаменателе (1) означает лишь, что вблизи резонанса необходимо учесть затухание зонных состояний. В нашем случае основную роль играет, по-видимому, рассеяние на случайном поле примесных центров. Тензор $X^{\gamma\alpha\beta}$ отличен от нуля для полупроводников, группа симметрии которых не содержит центра инверсии, и будет специализирован ниже для различных случаев. Формула (1) справедлива в случае, когда частоты ω и ω_1 близки к $\varepsilon_0/\hbar$,

$$\hbar\omega\sim\varepsilon_0;\quad \hbar\omega_1\sim\varepsilon_0;\quad \hbar(\omega-\omega_1)\ll\varepsilon_0. \tag{2}$$

Если к образцу приложено медленно меняющееся во времени (частота ω_0) сильное поле, то (1) изменяется. В этом случае, как и для междузонных переходов [3], появляется экспоненциальная зависимость, описывающая влияние поля на зонные состояния.

§ 2. **Постановка задачи.** Ориентируясь на условия эксперимента [2], рассмотрим компенсированный полупроводник с глубокими примесными центрами. Тогда в исследованном температурном интервале (от азотной до комнатной температуры) можно считать зону проводимости почти пустой, а валентную — почти заполненной. Кроме того, поскольку радиус локализации носителя заряда на центре мал, а концентрация центров не слишком велика, мы вправе рассматривать изолированный примесный центр. Наличие слабой температурной зависимости, обусловленной изменением энергии ионизации примеси с температурой, может быть легко учтено в конечных формулах.

Будем рассматривать случай, когда свет распространяется вдоль приложенного электрического поля, и, простоты ради, рассмотрим ситуацию, когда это направление совпадает с одной из кристаллографических осей.

§ 3. **Слабое поле.** Для вычисления нелинейной поляризуемости воспользуемся методом, предложенным в работе [4], где нелинейные коэффициенты получаются разложением по степеням поля потенциальной функции:

$$V = -\frac{1}{c}\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} dt \int \langle \mathbf{A}(t)\,\mathbf{j}(\mathbf{r}t)\rangle\, d^3r. \qquad (3)$$

Здесь $\mathbf{A}(t)$ — вектор-потенциал внешнего поля,

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}t) = -(ie\hbar/2m_0)[\psi^+(\mathbf{r}t)\nabla\psi(\mathbf{r}t) - \nabla\psi^+(\mathbf{r}t)\psi(\mathbf{r}t)] - \\ -(e^2/m_0c)\,\mathbf{A}(\mathbf{t})\,\psi^+(\mathbf{r}t)\,\psi(\mathbf{r}t),$$

$\hat{\mathbf{j}}$ — оператор плотности тока, $\psi(\mathbf{r}t)$ — оператор уничтожения электрона в точке $(\mathbf{r}, t)$. Если ввести обычным образом причинную функцию Грина $G(\mathbf{r}\mathbf{r}'tt')$ для электрона, то (3) можно записать в следующем виде:

$$V = -(ie\hbar/cm_0)\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} dt\int d^3r \lim_{\substack{t'\to t+0\\ \mathbf{r}'\to\mathbf{r}}} \mathbf{A}(t)\times \qquad (4)$$

$$\times\left[-\frac{i\hbar}{2}(\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t)\right] G(\mathbf{r}\mathbf{r}'tt').$$

Уравнение для $G(\mathbf{r}\mathbf{r}'tt')$ имеет вид:

$$\hat{H}(t)G \equiv \left\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m_0}\left[-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t)\right]^2 - w(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r})\right\}\times \\ \times G(\mathbf{r}\mathbf{r}'tt') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta(t-t'). \qquad (5)$$

Здесь $w(\mathbf{r})$ — самосогласованный периодический потенциал (псевдопотенциал) решетки, $v(\mathbf{r})$ — потенциал (псевдопотенциал) примесного центра.

Следует заметить, что при выводе уравнения (5) сделано обычное в оптике полупроводников предположение об однородности внешнего поля. Кроме того, в случае сильного поля, который будет рассмотрен ниже, необходимо было бы использовать технику неравновесных функций Грина, однако в рассматриваемых условиях применение этой техники не дало бы ничего нового по двум причинам. Во-первых, уравнение (5) получается и при использовании методики [5]. Во-вторых, функция распределения электронов в нашей системе, по крайней мере для не слишком сильных полей, задана заранее.

Введем теперь систему собственных функций оператора $\hat{H}(t=t_0)$. Состояния непрерывного спектра можно по-прежнему описывать номером зоны (в дальнейшем v или c) и квазиимпульсом (в общем случае — обобщенным). Это справедливо, если рассеяние на примеси слабое (короткодействующий или слабый потенциал). Волновую функцию носителя заряда на примеси обозначим через φ_i. Для не слишком сильных полей, таких, что можно пренебречь прямым туннелированием с примеси в зону, эти волновые функции составляют полный ортонормированный базис в любой момент времени. Это справедливо, если

$$(eFa)/\varepsilon_0 \ll 1, \qquad (6)$$

где a — радиус локализации носителя заряда на центре, F — амплитуда поля.

Тогда можно разложить $G(\mathbf{r}\mathbf{r}'tt')$ при фиксированных t и t' по этим функциям. Дальнейшие преобразования полностью аналогичны выкладкам работы [4]. В результате получим, что резонансная часть вклада (ω и $\omega_1>0$) в V, обусловленная наличием примесного центра, имеет вид:

$$\delta V = -e^2 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dt \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \left\{\boldsymbol{\varepsilon}(t)\mathbf{R}_\mathbf{p}^{ic}\widehat{G}_c^0(\varepsilon_0)\,\boldsymbol{\varepsilon}(t)\mathbf{R}_\mathbf{p}^{ci}\right\}. \quad (7)$$

Здесь

$$\widehat{G}_c^0 \equiv \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_0 - \varepsilon_\mathbf{p}^c + i\delta + ie\hbar\boldsymbol{\varepsilon}(t)\nabla_\mathbf{p}\right]^{-1},$$

$$\mathbf{R}_\mathbf{p}^{ic} = -\frac{\hbar^2}{m_0(\varepsilon_0+\varepsilon_\mathbf{p}^c)}\int \varphi_\mathbf{p}^c\nabla\varphi_i d^3r \equiv \frac{i\hbar}{m_0(\varepsilon^0+\varepsilon_\mathbf{p}^c)}\mathbf{P}_\mathbf{p}^{ic},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t}.$$

Оператор $G_c^0(\mathbf{p}\varepsilon t)$ определен равенством [4]

$$\widehat{G}_c^0(\mathbf{p}\varepsilon t)f(\mathbf{p}t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' f\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t);\ t'\right) \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}\left(\varepsilon^c_{\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}(x)} - \varepsilon\right)dx\right],$$

$\varepsilon_\mathbf{p}^c$ — закон дисперсии c-зоны, $\operatorname{Im}\varepsilon_\mathbf{p}^c>0$.

Заметим, что, вообще говоря, вклад «примесной части» в δV содержит несколько членов, аналогичных (7) и описывающих переходы с примеси в c- и v-зоны и обратно. Пренебрежение остальными членами, кроме (7), законно при надлежащем выборе частоты света и положения уровня Ферми.

Подставляя поле $\boldsymbol{\varepsilon}(t)$ в виде ряда Фурье, разлагая (7) в ряд по амплитудам $\boldsymbol{\varepsilon}_\omega$, производя необходимые операции и вычислив затем получающийся интеграл в $\mathbf{p}$-пространстве, получим, как и в [4], что в условиях (2) резонансная часть коэффициента нелинейной поляризуемости дается формулой (1).

Конкретизируем вид тензора $X^{\gamma\alpha\beta}$.

Как показано в [4], основной вклад в интересующие нас эффекты дают такие носители заряда, для которых

$$\varepsilon_\mathbf{p}^c \sim |\varepsilon_0 - \hbar\omega| \ll \varepsilon_0.$$

Тогда можно разложить $\mathbf{P}_\mathbf{p}^{ic}$ в ряд по импульсам $\mathbf{p}$:

$$P_\mathbf{p}^{ic\,\gamma} = P_\theta^\gamma + c^{\gamma\beta}(p_\beta - p_{0\beta}) + b^{\gamma\beta\delta}(p_\beta - p_{0\beta})(p_\delta - p_{0\delta}) + \ldots \quad (8)$$

Далее удобно рассмотреть несколько случаев.

1) $\hbar\omega<\varepsilon_0$.

а) $P_0^\gamma\neq 0$, $\gamma\equiv\{x, y, z\}$ — разрешенный переход,

$$X^{\gamma\alpha\beta} = \frac{P_\theta}{\sqrt{m_\theta}}A^{\gamma\alpha\beta}; \qquad P_0^2 = \sum_1^3 (P_0^\gamma)^2, \quad (9)$$

$$A^{\gamma\alpha\beta}=\frac{1}{2}\operatorname{Im}\left[-\frac{P_0^{\gamma}}{P_0}c^{\alpha\beta *}+c^{\gamma\beta}\frac{P_0^{\alpha *}}{P_0}\right]. \tag{10}$$

б) $P_0\equiv 0$ — запрещенный переход,

$$X^{\gamma\alpha\beta}=(\varepsilon_0-\hbar\omega)\operatorname{Im}B^{\gamma\alpha\beta}, \tag{11}$$

$$B^{\gamma\alpha\beta}\sim\sum_{\delta=1}^{3}\left\{2c^{\gamma\delta}b^{\alpha\beta\delta *}+c^{\alpha\beta *}b^{\gamma\delta\delta}+c^{\alpha\delta *}b^{\gamma\beta\delta}\right\}. \tag{12}$$

2) $\hbar\omega>\varepsilon_0$.

а) $P_0^{\gamma}\neq 0$,

$$A^{\gamma\alpha\beta}=\pm\frac{1}{2}\operatorname{Re}\left[-\frac{P_0^{\gamma}}{P_0}c^{\alpha\beta *}+c^{\gamma\beta}\frac{P_0^{\alpha *}}{P_0}\right];\quad\left(\begin{matrix}+i\to c\\ -v\to i\end{matrix}\right). \tag{13}$$

б) $P_0^{\gamma}=0$ при всех γ,

$$\operatorname{Im}B^{\gamma\alpha\beta}\to\pm\operatorname{Re}B^{\gamma\alpha\beta}\left(\begin{matrix}+i\to c\\ -v\to i\end{matrix}\right). \tag{14}$$

Автор глубоко признателен проф. В. Л. Бонч-Бруевичу за внимание и ценные замечания по содержанию данной работы, а также В. А. Морозовой за стимулирующие обсуждения полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Виноградов В. С. ФТТ, 1971, 13, с. 3266. [2] Морозова В. А., Остробородова В. В., Такля. ФТП, 1980, 14, с. 1785. [3] Келдыш Л. В. ЖЭТФ, 1958, 34, с. 1138. [4] Келдыш Л. В. В кн.: Нелинейная оптика. Новосибирск: Наука, 1968, с. 6—21. [5] Келдыш Л. В. ЖЭТФ, 1964, 47, с. 1515.

Поступила в редакцию
30.07.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 3

УДК 531.5

ПРОСТРАНСТВО СОСТОЯНИЙ ГРАВИТАЦИОННОГО ПОЛЯ В ГАМИЛЬТОНОВОМ ПОДХОДЕ К ОБЩЕЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ

А. Е. Пухов

(НИИЯФ)

1. **Введение.** В теории поля со связями необходимо рассматривать поля, медленно убывающие на бесконечности. Например, в электродинамике связь $\operatorname{div}E=\rho$ приводит к необходимости работать с полями, убывающими как $|\mathbf{x}|^{-2}$. С другой стороны, если мы хотим рассматривать полевую систему как гамильтонову теорию, необходимо, чтобы симплектическая форма (в электродинамике это $\int d^3x[\delta_1\mathbf{E}(x)\delta_2\mathbf{A}(x)-\delta_2\mathbf{E}(x)\delta_1\mathbf{A}(x)]$) была конечна. Условие конечности симплектической формы налагает ограничения сверху на асимптотику полей. Кроме того, пространство состояний полевой системы должно быть инвариантно относительно пространственно-временных сдвигов и преобразований Лоренца, что также налагает ограничения на функциональное пространство, описывающее физические состояния полевой системы.

В данной работе для общей теории относительности (ОТО) с асимптотически плоской метрикой построено пространство состояний Г,