В. М. Грабов, О. В. Кондаков

МЕЖЗОННЫЕ И ВНУТРИЗОННЫЕ МАГНИТООПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ ВИСМУТА

Экспериментально исследованы спектры магнитопропускания полосковой линии из монокристалла висмута при различных направлениях вектора магнитной индукции и волнового вектора электромагнитного излучения газового лазера с длиной волны 10,6 мкм в импульсном магнитном поле до 17 Тл в интервале температур 80–300 К. Приведены новые данные о параметрах энергетического спектра носителей заряда L-экстремумов зон в модифицированной модели Баррафа, циклотронных эффективных массах, тензоре диэлектрической проницаемости монокристаллов висмута в инфракрасной области.

Введение

Квантовые осцилляционные эффекты при изучении электронного энергетического спектра кристаллов твердых тел дают наиболее обширную информацию о предмете исследования. В большинстве случаев, однако, наблюдение квантовых осцилляционных и резонансных эффектов возможно только при низких температурах, близких к температуре кипения жидкого гелия, T = 4,2 К.

Малые эффективные массы ($m \approx 0{,}01 \cdot m_0$), низкие концентрации и высокие подвижности носителей заряда в полуметаллах типа висмута обеспечивают

наблюдение обусловленных переходами между уровнями Ландау квантовых осцилляций магнитооптического отражения в широком интервале температур вплоть до комнатных, достижение относительно простыми средствами ультраквантового предела магнитных полей. Резонансные оптические переходы носителей заряда на уровнях Ландау в кристаллах висмута дают уникальную информацию о закономерностях электронного энергетического спектра в широком диапазоне температур, что делает висмут модельным материалом при исследовании электронных свойств твердых тел [1]. Исходя из этого была поставлена задача на основе результатов магнитооптического эксперимента при температуре $T \geq 77$ К определить комплекс параметров электронного энергетического спектра кристаллов висмута в точке L зоны Бриллюэна, что представляет также интерес для практического применения кристаллов типа висмута в качестве эффективных низкотемпературных термоэлектрических материалов.

Методика и техника эксперимента

Спектры магнитоотражения монокристаллов висмута исследованы в широком интервале магнитных полей и температур [2], произведена идентификация особенностей, обусловленных межзонными и внутризонными переходами [3]. В данной работе с целью получения детальной информации не только о полевых положениях особенностей спектров, а о форме отклика кристалла висмута на внешнее электромагнитное возмущение исследовано пропускание планарного волновода со стенками из монокристалла висмута, внутри которого распространялось электромагнитное излучение [4]. В качестве источника излучения использовался газовый CO_2 лазер непрерывного действия с длиной волны $\lambda = 10{,}6$ мкм. Эксперимент проводился в геометрии Фарадея (рис. 1), в которой вектор индукции внешнего магнитного поля $\vec{A}$ параллелен волновому вектору $\vec{k}$ лазерного излучения и стенкам волновода. Такая конфигурация планарного волновода называется симметричной полосковой линией.

Магнитное поле создавалось импульсным соленоидом. Время нарастания магнитного поля до максимального значения составляло 500 мкс. Максимальная индукция магнитного поля составляла $B = 23$ Тл. Расстояние между двумя трансляционно-симметричными пластинками монокристалла висмута (1) и (2) не превышало $D = 10$ мкм для обеспечения эффективного взаимодействия электромагнитного излучения со стенками волновода.

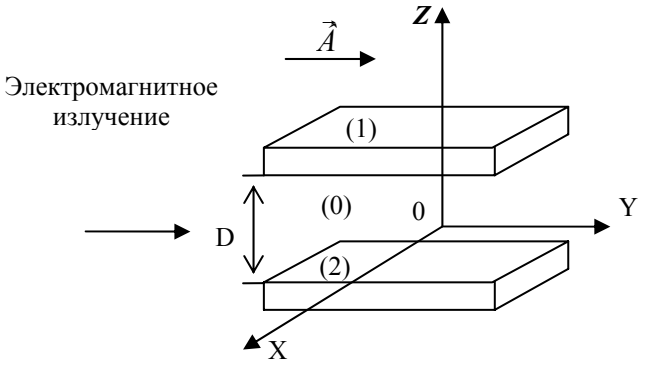

Рис. 1. Взаимное расположение вектора индукции магнитного поля $\vec{A}$, волнового вектора электромагнитного излучения $\vec{k}$ и исследуемого монокристалла относительно выбранной системы координат.
D — зазор между симметричными монокристаллами висмута (*1*) и (*2*)

Монокристаллические слитки висмута были получены методом зонной перекристаллизации. Образцы готовились из монокристаллов висмута методом электроэрозионной резки. Рабочие поверхности монокристаллов полировались механохимическим методом до придания им состояния совершенного зеркала.

Для решения поставленной задачи исследовались образцы трех ориентаций, в которых вектор индукции внешнего магнитного поля $\vec{A}$ был параллелен биссекторной, бинарной или тригональной осям кристаллической решетки висмута.

Сигнал от исследуемого образца фиксировался малоинерционным фотоэлектрическим приемником излучения, максимум спектральной чувствительности которого приходился на длину волны $\lambda = 10{,}2$ мкм. С помощью аналого-цифрового преобразователя сигнал преобразовывался в цифровой код и записывался в память компьютера. Для исключения случайных погрешностей эксперимент повторялся в идентичных условиях, результаты которых суммировались с последующим усреднением.

Следует отметить, что интенсивность полезного сигнала при использовании метода полосковой линии превосходила соответствующую величину в случае однократного отражения от поверхности исследуемого кристалла более чем в 2 раза, что обеспечило возможность получения детальной информации о форме отклика на электромагнитное возмущение.

Экспериментальные результаты

На рис. 2 и 3 приведена зависимость пропускания полосковой линии [4] из висмута (сплошная линия) от величины магнитного поля, когда вектор индукции импульсного магнитного поля $\vec{A}$ был направлен вдоль биссекторной оси кристаллической решетки висмута при температуре T = 77 К. Зависимости интенсивности излучения, прошедшего через симметричную полосковую линию (СПС), от величины магнитного поля были также получены для случаев, когда вектор индукции импульсного магнитного поля $\vec{A}$ был направлен вдоль бинарной (рис. 4 и 5) и тригональной (рис. 6) оси.

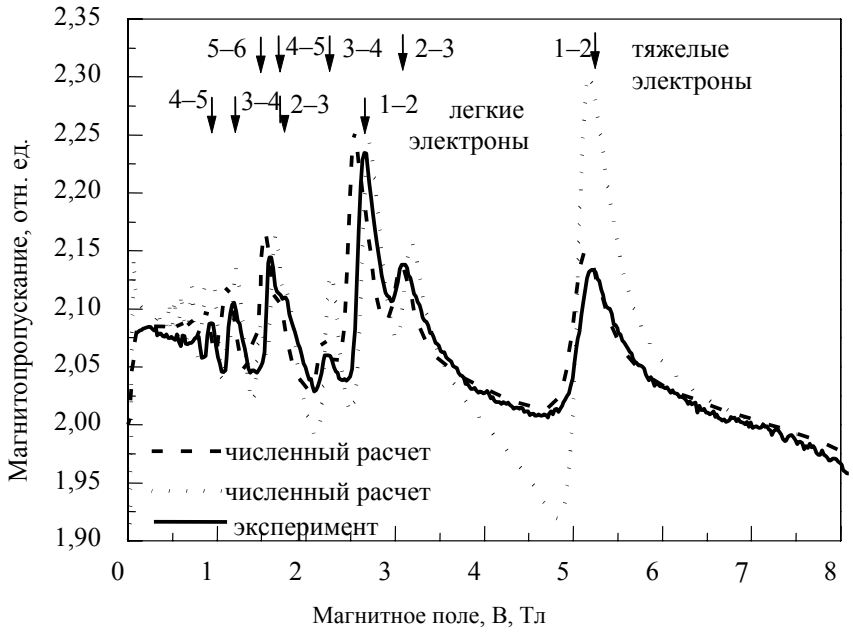

Рис. 2. Форма линии межзонных оптических переходов в ориентации, когда вектор напряженности внешнего магнитного поля параллелен биссекторной оси. Сплошная линия — эксперимент; пунктирная линия — численный расчет, когда моделирование проводилось раздельно для каждого значения циклотронных масс; точечная линия — численный расчет в предположении единого значения $\varepsilon_l^{\text{áèñ.}}$. T = 77 К

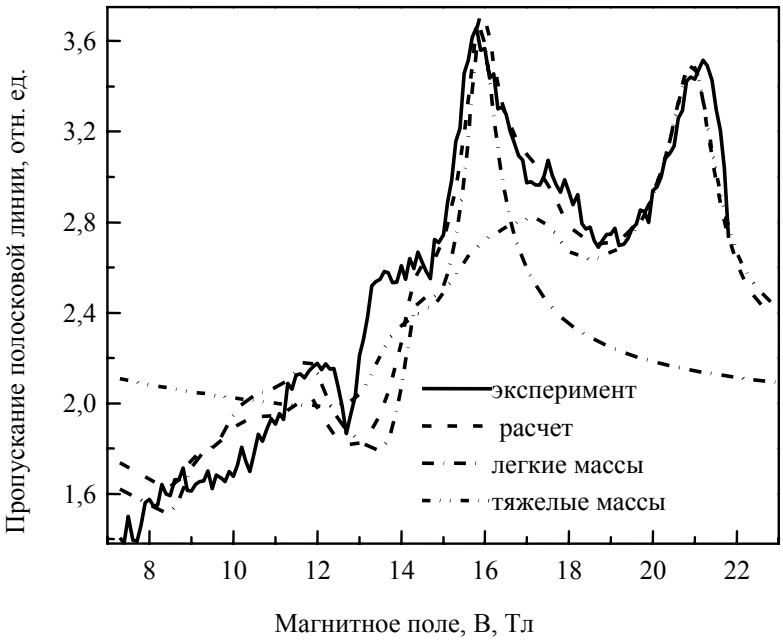

Рис. 3. Форма линии межзонных и внутризонных оптических переходов в ориентации, когда вектор напряженности внешнего магнитного поля параллелен биссекторной оси. Сплошная линия — эксперимент; пунктирная линия — численный расчет; штрихпунктирная линия — численный расчет для электронов с меньшими циклотронными массами; штрихпунктирная линия с двумя точками между штрихами — численный расчет для электронов с большими циклотронными массами. T = 77 K

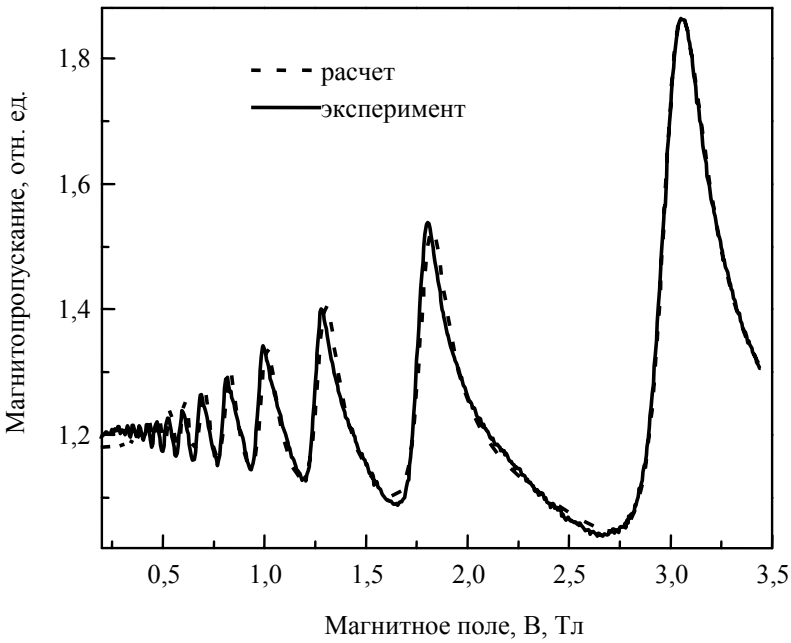

Рис. 4. Форма линии межзонных оптических переходов в ориентации, когда вектор напряженности внешнего магнитного поля параллелен бинарной оси. Сплошная линия — эксперимент; пунктирная линия — численный расчет. T = 77 K

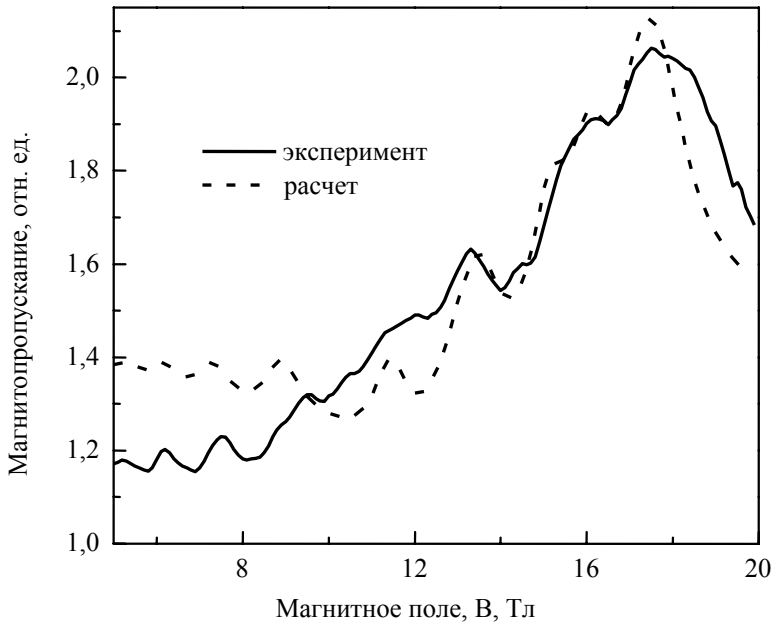

Рис. 5. Форма линии межзонных и внутризонных оптических переходов в ориентации, когда вектор напряженности внешнего магнитного поля параллелен бинарной оси. Сплошная линия — эксперимент; пунктирная линия — численный расчет. T = 77 K

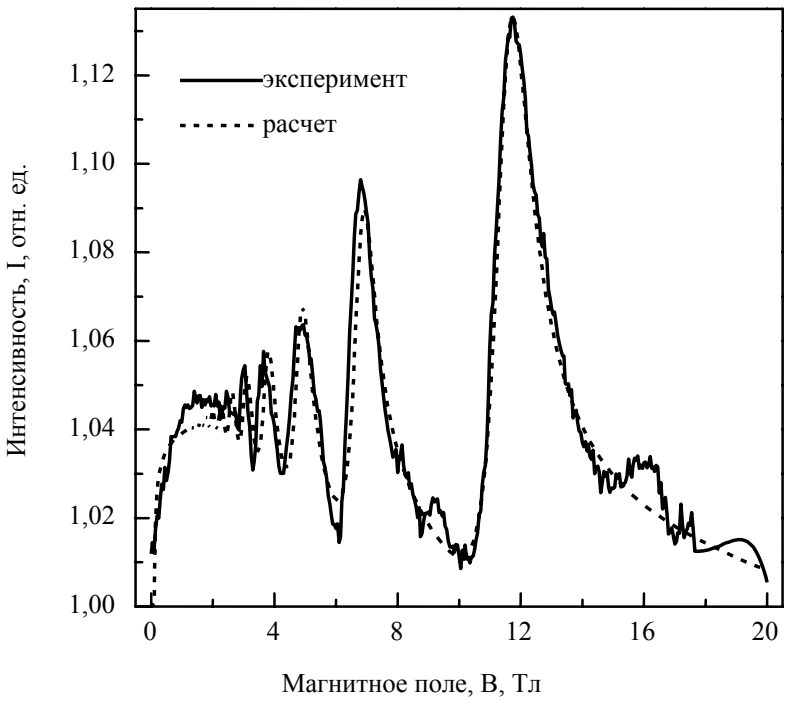

Рис. 6. Форма линии межзонных оптических переходов в ориентации, когда вектор напряженности внешнего магнитного поля параллелен тригональной оси. Сплошная линия — эксперимент; пунктирная линия — численный расчет. T = 77 K

Моделирование магнитооптических явлений в монокристаллах висмута

Анализ результатов магнитооптического эксперимента проводился методом моделирования формы экспериментальной линии [5] в рамках модифицированной модели Бараффа [6] электронного энергетического спектра висмута.

Исходной являлась двузонная модель энергетического спектра. Невозмущенный гамильтониан имеет вид [6]:

$$\acute{I}_0 = \begin{bmatrix} \varepsilon \cdot \tilde{I} & i \cdot \sqrt{\varepsilon} \cdot K_\alpha \cdot \sigma_\alpha \\ -i \cdot \sqrt{\varepsilon} \cdot K_\alpha \cdot \sigma_\alpha & \varepsilon \cdot I \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где I — единичная матрица второго ранга, $\varepsilon = \frac{E_g}{2}$ — половина ширины запрещенной зоны, σ_α — двухрядные матрицы Паули, K_α — компоненты вектора $\vec{K}$, который связан с кристаллическим оператором импульса $\hbar \cdot \vec{k}$ и оператором координаты $\vec{X}$ посредством соотношений [6]:

$$K_1 \pm i \cdot K_2 = \left(\hbar \Big/ \sqrt{m_c^*} \right) \cdot \left(\tilde{k}_1 \pm \tilde{k}_2 \right), \quad (2)$$

$$K_3 = \left(\hbar \Big/ \sqrt{m_B^*} \right) \cdot k_3, \quad (3)$$

где

$$\tilde{k}_1 = k_1 + \left(e \cdot B \Big/ 2 \cdot \hbar \cdot c \right) \cdot X_2, \quad (4)$$

$$\tilde{k}_2 = k_2 - \left(e \cdot B \Big/ 2 \cdot \hbar \cdot c \right) \cdot X_1. \quad (5)$$

Магнитное поле направлено вдоль направления $\alpha = 3$, а направления $\alpha = 1, 2$ перпендикулярны друг другу и вектору индукции внешнего магнитного поля $\vec{B}$. $m_B^* = \left(\vec{h} \cdot m^* \cdot \vec{h} \right) \cdot m_o$ — эффективная масса носителей заряда вдоль направления вектора магнитной индукции, m_o — масса свободного электрона, m^* — тензор эффективных масс L-электронов висмута,

$$m^* = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & m_4 \\ 0 & m_4 & m_3 \end{pmatrix}$$ — ось 1 направлена вдоль бинарной оси кристаллической решетки висмута, 2 — вдоль биссекторной, 3 — вдоль тригональной, $\vec{h}$ — единичный вектор вдоль направления вектора индукции магнитного поля. $m_c^* = \left(\det m^* \Big/ m_B^* \right)^{1/2} \cdot m_o^{3/2}$ — циклотронная масса носителей заряда, где $\det m^*$ — детерминант матрицы тензора эффективных масс, B — величина индукции магнитного поля.

В магнитном поле вектор $\vec{K}$ становится оператором, удовлетворяющим следующему соотношению:

$$\vec{K} \times \vec{K} = i \cdot \beta^* \cdot \vec{B}, \quad (6)$$

$$\beta^* = \frac{|e| \cdot \hbar}{m_c^* \cdot c}, \quad (7)$$

где c — скорость света в вакууме.

Барафф модифицировал двузонную модель, представив гамильтониан H_B в присутствии магнитного поля в виде суммы двух членов [6]:

$$H_B = H_O + H_P, \quad (8)$$

где H_P — возмущенная часть гамильтониана.

Барафф предположил, что она имеет вид:

$$H_P = \begin{bmatrix} \left(\vec{K} B^C \vec{K} \right) I + \vec{L}_\alpha^C \cdot \sigma_\alpha & 0 \\ 0 & \left(\vec{K} B^V \vec{K} \right) I + \vec{L}_\alpha^V \sigma_\alpha \end{bmatrix} \quad (9)$$

где 0 означает нулевую матрицу (2×2), суммирование в (9) производится по $\alpha = 1, 2, 3$.

Безразмерный тензор $B^{C,V}$ не зависит от магнитного поля и преобразуется подобно тензору эффективных масс, так что:

$$\vec{K}\cdot B^{C,V}\cdot\vec{K}=b_1^{C,V}\cdot\left(\hbar^2/m_c^*\right)\cdot\left(\tilde{k}_1^2+\tilde{k}_2^2\right)+b_3^{C,V}\cdot\left(\hbar^2/m_B^*\right)\cdot\tilde{k}_3^2, \quad (10)$$

где

$$b_3^{C,V}=\vec{h}\cdot B^{C,V}\cdot\vec{h}, \quad (11)$$

$$b_1^{C,V}=\left(\det B^{C,V}/b_3^{C,V}\right)^{1/2}. \quad (12)$$

Вектор $\vec{L}^{C,V}$ в (9) линейно зависит от B и определяется через безразмерный вектор $\vec{\ell}^{C,V}$:

$$\vec{L}^{C,V}=\beta^*\cdot B\cdot\vec{\ell}^{C,V}. \quad (13)$$

Авторами [6] были приняты упрощающие предположения:

$$b_1^C=-b_1^V, \quad (14)$$

$$\vec{\ell}^C=-\vec{\ell}^V. \quad (15)$$

Выражение для уровней Ландау при $j>0$, где $j=n+1/2-S$ — главное квантовое число, $S=\pm 1/2$ — спин электрона, $n=0,1,2\ldots$ — орбитальное квантовое число, когда безразмерный волновой вектор вдоль направления вектора индукции магнитного поля ξ — малая величина [6] принимает вид:

$$E_j^{\pm}=\pm\left\{\left\{\frac{1}{4}E_g^2\left(1+\xi^2\right)+E_g j\beta^* B\right\}^{1/2}-2S\left|G\beta^*\right|B\right\}, \quad (16)$$

где спиновой параметр G определяется как:

$$G=-\left(b_1^C+\vec{\ell}_3^C\right)=\left(b_1^V+\vec{\ell}_3^V\right), \quad (17)$$

$$\xi=\frac{\hbar\cdot k_3}{\left(\frac{E_g}{2}\cdot m_B^*\right)^{1/2}}. \quad (18)$$

Выражение для энергетического положения уровней Ландау с j = 0 в валентной зоне и зоне проводимости выглядит следующим образом:

$$E_{j=0}^{\pm}(\xi)=\pm\left[\left|\mathrm{H}_{11}\right|^2+\left|\mathrm{H}_{12}\right|^2\right]^{1/2}; \quad (19)$$

$$\mathrm{H}_{11}=E_0-\left|G\cdot\beta^*\right|\cdot B\cdot\left(1+\xi^2\right)^{-1/2}-\frac{\left|L_\perp\right|}{2}\cdot\beta^*\cdot B\cdot\left(1+\xi^2\right)^{1/2}\cdot\left(1+\xi^2/4\right)-\frac{\left|L_\perp\right|^2\cdot b_1}{E_g/2}\cdot\left(\beta^*\cdot B\right)^2=-\mathrm{H}_{22}; \quad (20)$$

$$\mathrm{H}_{12}=i\cdot\xi\cdot\left|G\cdot\beta^*\right|\cdot B\cdot\left(1+\xi^2\right)^{-1/2}+Q\cdot\beta^*\cdot B+i\cdot\xi\cdot\frac{\left|L_\perp\right|^2\cdot b_1}{E_g}\cdot\left(\beta^*\cdot B\right)^2=\mathrm{H}_{21}^*, \quad (21)$$

где $E_0=\left|E_0^{\pm}\right|$, $E_0^{\pm}=\pm E_G/2\cdot\left(1+\xi^2\right)^{1/2}$ — невозмущенная энергия в нулевом магнитном поле.

$$\left|L_\perp\right|^2=\left|L_1^C-i\cdot L_2^C\right|^2=\left|L_1^V-i\cdot L_2^V\right|^2, \quad (22)$$

$$b_1=\left|b_1^C\right|=\left|b_1^V\right|. \quad (23)$$

Несмотря на теоретические и экспериментальные предпосылки, утверждающие, что нулевые уровни Ландау зоны проводимости и валентной зоны не должны взаимодействовать друг с другом, для объяснения магнитооптических спектров был введен член, отвечающий за их взаимодействие — $Q\cdot\beta^*\cdot B$ [6], зависящий от величины магнитного поля.

Коэффициент пропускания полосковой линии *T(B)* определяется отношением энергии $W(B)$, переносимой волной при некотором значении магнитного поля B, к энергии $W(0)$, переносимой волной при $B=0$:

$$T(B)=\frac{W(B)}{W(0)}. \quad (24)$$

Энергия W волны, прошедшей в единицу времени через поперечное сечение полосковой линии размером $x \cdot D$ (x изменяется от 0 до x, z изменяется от $-\frac{D}{2}$ до $+\frac{D}{2}$ — см. рис. 1), определяется выражением:

$$W = \iint_{xz} \overline{S}_y dxdz \ , \qquad (25)$$

где $\overline{S}_y = \frac{1}{2}\left[\vec{E}^{(0)}, \vec{H}^{*(0)}\right]_y$ — среднее значение y-компоненты вектора Умова—Пойтинга. $\vec{E}^{(0)}, \vec{H}^{(0)}$ — векторы напряженности электрического и магнитного полей волны, распространяющейся в зазоре между пластинами из монокристалла висмута (рис. 1).

Исследуемая среда, монокристаллический образец висмута, учитывалась в численном расчете коэффициента пропускания полосковой линии введением комплексного тензора диэлектрической проницаемости [7]:

$$\varepsilon = \varepsilon_l + \frac{\sigma}{i \cdot \omega \cdot \varepsilon_o}, \qquad (26)$$

где ω — круговая частота падающего электромагнитного излучения; ε_l — диэлектрическая проницаемость, обусловленная всеми процессами, за исключением межзонных и внутризонных переходов на уровнях Ландау валентной зоны и зоны проводимости; ε_o — электрическая постоянная; σ — тензор высокочастотной комплексной удельной электропроводности:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -e^2 \cdot \cdot \sum_{l,l'} \frac{\left(f_l - f_{l'}\right) \cdot \left\langle l \middle| V_\alpha \middle| l' \right\rangle \cdot \left\langle l' \middle| V_\beta \middle| l \right\rangle}{\left(E_l - E_{l'}\right) \cdot \left(\left(\frac{i}{\hbar}\right) \cdot \left(E_l - E_{l'}\right) - i \cdot \omega + \frac{1}{\tau}\right)}, \qquad (27)$$

где α, β — индексы, означающие оси координат; α, $\beta = 1, 2, 3$; e — заряд электрона; l, l' — полные наборы квантовых чисел, характеризующие начальные l и конечные l' состояния; V_α и V_β — операторы скорости; τ — время релаксации; f_l, $f_{l'}$ — распределения Ферми для электронов, находящихся на уровнях Ландау с наборами квантовых чисел l, l':

$$f_l = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_l - E_f}{k_o \cdot T}\right)}, \qquad (28)$$

где E_f — энергия Ферми, k_o — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, при которой находится исследуемый кристалл.

Полный набор квантовых чисел l, l' включает: индекс зоны «+» — проводимости, «—» — валентной зоны, n — номер уровня Ландау, $s = \pm\frac{1}{2}$ — спиновое квантовое число, $E_l, E_{l'}$ — энергии уровней Ландау начальных l и конечных l' состояний, а также квазинепрерывный спектр значений κ_z.

Суммирование по полным наборам квантовых состояний l, l' упрощается, так как выражения для энергетического положения уровней Ландау в зависимости от величины магнитного поля не зависят от составляющей волнового вектора в плоскости, перпендикулярной направлению вектора индукции внешнего магнитного поля. Суммирование по квазинепрерывным значениям волнового вектора κ_z вдоль направления вектора индукции внешнего магнитного поля заменяется интегрированием.

В выражении (27) величина $\left\langle l \middle| V_\alpha \middle| l' \right\rangle$ — матричный элемент оператора скорости. Расчет матричных элементов оператора скорости проводился в приближении тензора эффективных масс. Они имеют почти постоянное значение в зависимости от величины магнитного поля для межзонных переходов электронов [3].

Обсуждение результатов

Оптические переходы электронов между уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости происходят, когда энергия кванта электромагнитного излучения совпадает с расстоянием между соответствующими уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости. Согласно двузонной модели Лэкса [8] и правилам отбора для $n >> 1$ межзонные переходы периодичны в обратном магнитном поле с периодом

$$\Delta\left(\frac{1}{B_n}\right) \equiv \frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} = 4 \cdot \frac{E_g}{m_c^*} \cdot \frac{e \cdot \hbar}{c \cdot \left(E_p^2 - E_g^2\right)}, \quad (29)$$

где B_n — резонансное значение магнитного поля для переходов между уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости с орбитальными квантовыми числами n и $n+1$; E_g — ширина запрещенной зоны в точке L зоны Бриллюэна; m_c^* — эффективная циклотронная масса на дне зоны проводимости; E_p — энергия кванта электромагнитного излучения.

Рассчитанные по формуле (29) периоды осцилляций в пределах погрешности измерений совпадают с периодичностью расположения максимумов осцилляций в обратном магнитном поле.

Как следует из (29), магнитооптические осцилляции, которые являются следствием межзонных переходов электронов, несут информацию о величине отношения ширины запрещенной зоны E_g в точке L зоны Бриллюэна и эффективной циклотронной массы на дне зоны проводимости m_c^*, что обычно используется для определения $\frac{E_g}{m_c^*}$ [8].

В отличие от [4], в данной работе выполнено моделирование магнитоотражения с учетом не только положения максимумов сигнала, но и формы линии. На рис. 2 и 3 совместно с экспериментальными данными пунктирными линиями приведены расчетные зависимости коэффициента пропускания полосковой линии из висмута от величины магнитного поля, когда вектор индукции импульсного магнитного поля $\vec{A}$ был направлен вдоль биссекторной оси кристаллической решетки висмута.

Моделирование показало, что в магнитном поле до $B = 6$ Тл наблюдались осцилляционные особенности (рис. 2), обусловленные межзонными переходами электронов на уровнях Ландау валентной зоны и зоны проводимости. Этот вывод подтверждается наличием двух рядов осцилляций, так как для случая, когда вектор индукции импульсного магнитного поля $\vec{A}$ направлен вдоль биссекторной оси, в соответствии с представлениями об электронной структуре висмута имеются электроны, характеризующиеся двумя разными циклотронными массами, различающимися в два раза. Электроны с меньшими циклотронными массами называют легкими биссекторными электронами, а с большими — тяжелыми биссекторными электронами.

Расчет в рамках модифицированной модели Бараффа зависимости коэффициента пропускания полосковой линии от величины магнитного поля показал, что не существует единого значения компоненты тензора ε_l вдоль биссекторной оси. На рис. 2 точечной линией приведены результаты моделирования магнитооптического спектра в предположении одной комплексной константы $\varepsilon_l^{\acute{a}\grave{e}\tilde{n}\tilde{n}.}$. Оказалось, невозможно описать отношение интенсивностей особенностей, происходящих от межзонных переходов электронов с разной эффективной циклотронной массой. Задачу удалось решить введением для электронов разных циклотронных масс различных комплексных констант $\varepsilon_{\ddot{e},\tilde{a}\acute{e}}^{\acute{a}\grave{e}\tilde{n}\tilde{n}.} = (120, 85)$ и $\varepsilon_{\grave{o}\acute{y}\ddot{w}\varkappa}^{\acute{a}\grave{e}\tilde{n}\tilde{n}.} = (160, 100)$.

Различия в константных значениях компонент тензора ε_l сохраняются во всем

диапазоне магнитных полей ($B_{мак\,с}$ = 22 Тл) и подтверждаются результатами, полученными для бинарного направления вектора индукции магнитного поля [9], когда экспериментально наблюдаются также два ряда осцилляций для электронов разных циклотронных масс (рис. 5).

На рис. 2 пунктирной линией представлены результаты моделирования формы линии магнитооптического эксперимента в предположении о двух константных значениях тензора ε_l, характерных для биссекторного направления вектора индукции магнитного поля. Расчетная кривая в деталях воспроизводит все особенности, характерные для экспериментальной формы линии. Наибольшие расхождения между расчетной и экспериментальной кривыми наблюдаются для особенностей, расположенных в области полей от B = 2,7 Тл до B = 3,0 Тл. В полях от B = 2,5 Тл до B = 3,5 Тл наблюдается наиболее интенсивная особенность (максимум при B = 2,7 Тл), которая формируется оптическими межзонными переходами электронов с меньшей биссекторной циклотронной массой на уровнях Ландау с j = 1 и j = 2 валентной зоны и зоны проводимости и менее интенсивная, но более широкая по магнитному полю особенность (максимум при B = 3,1 Тл), которая формируется оптическими межзонными переходами электронов с большей биссекторной циклотронной массой на уровнях Ландау с j = 2 и j = 3 валентной зоны и зоны проводимости. Таким образом, практически в одном диапазоне магнитных полей происходят два ряда переходов электронов разной массы между зонами с интенсивностями, различающимися примерно в два раза. Так как переходы происходят на уровнях Ландау с малыми квантовыми числами, и электронная вместимость этих уровней довольно велика, на что указывает значительная интенсивность рассматриваемых особенностей, то в зоне проводимости одновременно оказывается значительное количество электронов разной массы с энергией, различающейся не более чем на 6 мэВ. Это, в свою очередь, вызывает усиление процессов рассеяния, что в τ приближении описывается уменьшением времени релаксации, а это, в свою очередь, вызывает локальное по магнитному полю уширение особенностей в магнитопропускании, что и приводит к меньшему провалу между двумя резонансами, по сравнению с расчетными значениями.

Наличие расхождения формы линии экспериментального магнитооптического спектра и расчетного в кластере, образованном рассматриваемыми переходами (1–2 переходы легких, 3–4 переходы тяжелых биссекторных электронов на рис. 2), подтверждается исследованиями, проведенными в диапазоне температур 77–280 К [2].

Определение параметра $\frac{E_g}{m_c^*}$ методом моделирования формы линии экспериментальной кривой обладает очевидным преимуществом по сравнению с расчетом периода осцилляций в обратном магнитном поле по полевым положениям максимумов магнитооптических осцилляций. Действительно, связывание резонансных полей оптических переходов электронов между уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости с максимумами особенностей в магнитоотражении или магнитопропускании, строго говоря, не обоснованно. Моделирование формы линии магнитооптического эксперимента, во-первых, свободно от такого предположения и, во-вторых, позволяет задействовать в процесс определения искомого параметра все имеющиеся в распоряжении экспериментальные точки зависимости пропускания полосковой линии от величины магнитного поля.

В табл. 1 представлены значения параметра $\frac{E_g}{m_c^*}$ для легких и тяжелых биссекторных электронов висмута при Т = 77 К, найденные путем определения периода магнитооптических осцилляций в обратном магнитном поле [8] и методом моделирования формы линии магнитооптиче-

ского эксперимента [5], а также приведены значения, определенные в работе [6] при T = 22,5 K. Меньшие значения параметра $\frac{E_g}{m_c^*}$, полученные методом моделирования формы линии магнитооптических особенностей, обусловлены сдвигом полевого положения максимумов магнитооптических особенностей относительно значений магнитных полей, в которых происходят резонансные оптические переходы электронов между валентной зоной и зоной проводимости. Наличие такого сдвига объясняется значительным вкладом мнимой части ε_l в компоненты тензора ε ($\varepsilon_{\text{ёгёг}}^{\text{áèññ.}} = (120, 85)$, $\varepsilon_{\text{òÿæ}}^{\text{áèññ.}} = (160, 100)$).

Исследование межзонных переходов электронов на уровнях Ландау валентной зоны и зоны проводимости в ориентациях, когда вектор индукции внешнего магнитного поля $\vec{A}$ был параллелен биссекторной, бинарной и тригональной осям кристаллической решетки висмута, позволило впервые при температуре T ≥ 77 K определить параметр $\frac{E_g}{m_c^*}$ для всех групп носителей заряда в точке L зоны Бриллюэна. На рис. 2 и 3 приведены пунктирными линиями расчетные значения коэффициента пропускания (24) полосковой линии в зависимости от величины магнитного поля с параметрами $\frac{E_g}{m_c^*}$, приведенными в табл. 1.

Более того, предложенный в данной работе метод исследования структуры электронного энергетического спектра позволил впервые в магнитооптическом эксперименте наблюдать осцилляции, связанные с межзонными переходами тяжелых бинарных (рис. 5) и тригональных (рис. 6) электронов и надежно определить величины соответствующих циклотронных масс (табл. 2).

Таблица 1

Отношение ширины запрещенной зоны E_g в точке *L* зоны Бриллюэна к эффективной циклотронной массе m_c^* на дне зоны проводимости

Биссекторные электроны	$\frac{E_g}{m_c^*}$ (эВ/масса свободного электрона)		
	Настоящая работа		Моделирование формы линии [6]
	по максимумам осцилляций	моделирование формы линии	
Легкие	7,86	7,32	7,43
Тяжелые	3,98	3,74	3,77

Таблица 2

Значения циклотронных масс на дне зоны проводимости

Циклотронная масса	Эксперимент	Расчет	Погрешность
Тригональная	$6{,}040 \cdot 10^{-3}$	$6{,}049 \cdot 10^{-3}$	$9{,}0 \cdot 10^{-6}$
Тяжелая бинарная	$1{,}372 \cdot 10^{-2}$	$1{,}377 \cdot 10^{-2}$	$5{,}0 \cdot 10^{-5}$
Легкая бинарная	$1{,}520 \cdot 10^{-3}$	$1{,}526 \cdot 10^{-3}$	$6{,}0 \cdot 10^{-6}$
Легкая биссекторная	$1{,}319 \cdot 10^{-3}$	$1{,}323 \cdot 10^{-3}$	$5{,}0 \cdot 10^{-6}$
Тяжелая биссекторная	$2{,}60 \cdot 10^{-3}$	$2{,}61 \cdot 10^{-3}$	$1{,}0 \cdot 10^{-5}$

Примечание. Значения циклотронных масс приведены в единицах массы свободного электрона. В первом столбце приведены значения циклотронных масс, полученные моделированием формы экспериментальной линии магнитооптического эксперимента. Во втором столбце приведены результаты перерасчета циклотронных масс из восстановленного по экспериментальным данным тензора эффективных масс электронов в точке L зоны Бриллюэна. В третьем столбце приведена погрешность восстановления циклотронных масс из полученного численной процедурой тензора эффективных масс [9].

Определение циклотронных масс возможно из значений параметра $\frac{E_g}{m_c^*}$. Для этого необходимо знать величину E_g. В рассматриваемом эксперименте ширина запрещенной зоны E_g в точке L зоны Бриллюэна является малой величиной по сравнению с энергией кванта электромагнитного излучения E_p. Поэтому для определения параметра E_g необходимы сведения о межзонных и внутризонных переходах на уровнях Ландау с главным квантовым числом $j = 0$, когда особенности взаимодействия нижнего уровня Ландау зоны проводимости и верхнего уровня Ландау валентной зоны приводят к тому, что значение параметра E_g оказывает значительное влияние на форму экспериментальной линии. В экспериментально достижимых магнитных полях такие переходы электронов наблюдались, когда вектор индукции импульсного магнитного поля $\vec{A}$ был направлен вдоль биссекторной и бинарной оси кристаллической решетки висмута (рис. 3 и 5).

На рис. 3 представлен магнитооптический спектр, образованный особенностями, за которые ответственны оптические межзонные (штрихпунктирная линия) и внутризонные (штрихпунктирная линия с двумя точками между штрихами) переходы электронов на уровнях Ландау с $j = 0$ валентной зоны и зоны проводимости. Так как циклотронные массы биссекторных электронов отличаются примерно в два раза, то в полях до 22 Тл наблюдаются особенности, происходящие от всех трех электронных эллипсоидов. Моделирование формы экспериментальной линии, представленное на рис. 3 штрихпунктирными линиями, оказалось весьма чувствительным к зависимости ширины запрещенной зоны от величины магнитного поля. В соответствии с (19) энергетическое положение уровней Ландау с $j = 0$ определяется параметрами G, l_1^c, l_3^c, $|L_\perp|^2$. Разность энергий уровней Ландау с $j = 0$ зоны проводимости и валентной зоны представляет собой величину запрещенной зоны при данном значении магнитного поля $E_g(B)$. В соответствии с (19) $E_g(B)$ зависит также от величины приведенного волнового вектора ξ. Расчет коэффициента пропускания полосковой линии в рамках вышеизложенного алгоритма для различных наборов параметров G, b_1^c, l_3^c, $|L_\perp|^2$ позволил восстановить форму линии магнитооптического эксперимента в области переходов электронов с участием уровней Ландау с $j = 0$ (рис. 3 и 5). Выбор значений параметров G, b_1^c, l_3^c, $|L_\perp|^2$ производился по наилучшему совпадению расчетного и экспериментального спектров магнитопропускания. В табл. 3 приведены значения параметров G, b_1^c, l_3^c, $|L_\perp|^2$ для случая, когда вектор индукции магнитного поля параллелен биссекторной оси. Расчет зависимости энергетического положения уровня Ландау зоны проводимости от величины магнитного поля (19) с набором параметров G, b_1^c, l_3^c, $|L_\perp|^2$, приведенных в табл. 3, представлен на рис. 7 и 8 для случая, когда вектор индукции магнитного поля направлен вдоль биссекторной оси. В соответствии с правилами отбора [6] и выражениями (16), (19) рассчитывались значения магнитных полей, в которых происходят разрешенные и запрещенные межзонные и внутризонные переходы электронов на уровнях Ландау валентной зоны и зоны проводимости. Рассчитанные значения резонансных полей переходов электронов с участием уровней Ландау с $j = 0$ для легких и тяжелых биссекторных электронов [9], полевая зависимость энергетического положения уровней Ландау с $j = 0$ (рис. 7 для электронов с меньшей циклотронной массой, рис. 8 для электронов с большей циклотронной массой) при различных значениях приведенного волнового вектора ξ вдоль направления вектора индукции магнитного поля позволяют сделать заключение о происхождении структур, наблюдаемых на рис. 3.

Таблица 3

Параметры модифицированного спектра Бараффа

Параметры	Настоящая работа		[6]	
	легкие электроны	тяжелые электроны	легкие электроны	тяжелые электроны
G	$2{,}18\times10^{-3}$	$-8{,}6\times10^{-3}$	$-7{,}3\times10^{-3}$	$-8{,}6\times10^{-3}$
b_1^c	$2{,}1\times10^{-4}$	$9{,}14\times10^{-2}$	$2{,}93\times10^{-2}$	$9{,}14\times10^{-2}$
l_3^c	$1{,}97\times10^{-3}$	$-8{,}28\times10^{-2}$	$-2{,}20\times10^{-2}$	$-8{,}28\times10^{-2}$
$\lvert L_\perp\rvert^2$	$5{,}92\times10^{-4}$	$1{,}07\times10^{-3}$	$9{,}0\times10^{-4}$	$10{,}7\times10^{-4}$
Q	$6{,}01\times10^{-3}$	$3{,}6\times10^{-3}$	$2{,}4\times10^{-3}$	$3{,}6\times10^{-3}$

Примечание. Параметры G, b_1^c, l_3^c, $\lvert L_\perp\rvert^2$ — безразмерные величины.

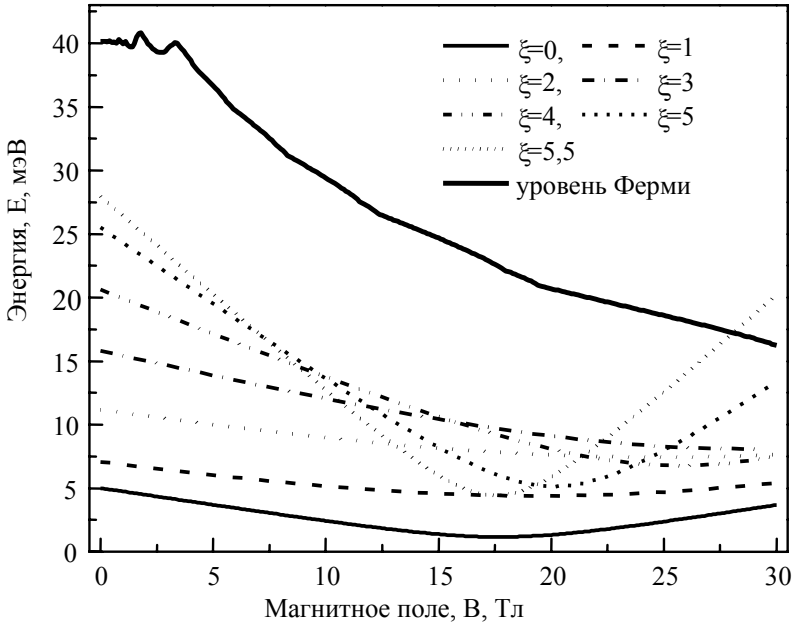

Рис. 7. Полевая зависимость нижнего уровня Ландау зоны проводимости для легких биссекторных электронов при различных значениях приведенного волнового вектора

Наибольшей интенсивностью обладают разрешенные межзонные переходы (для легких биссекторных электронов при $B = 16$ Тл, для тяжелых биссекторных электронов при $B = 21$ Тл). Однако этими особенностями магнитооптические спектры не исчерпываются. Энергетическое расстояние между уровнями Ландау с $j = 0$ валентной зоны и зоны проводимости $E_g = 10 \pm 0{,}5$ мэВ в точке L зоны Бриллюэна при $B = 0$. Этот результат получен моделированием формы экспериментальной линии для случаев, когда вектор индукции магнитного поля направлен вдоль биссекторной (рис. 3) и бинарной (рис. 5) осей.

На рис. 9 приведены расчетные зависимости коэффициента пропускания полосковой линии от величины магнитного поля для ориентации, когда вектор индукции магнитного поля параллелен биссекторной оси. Расчетные кривые показывают, что изменение ширины за-

прещенной зоны на 1 мэВ от величины 10 мэВ (кривые *1* и *2* рис. 9) приводит к существенным отклонениям от экспериментально найденной формы линии. На графиках 4 и 5 приведены результаты расчета, когда при $E_g = 9$ мэВ и $E_g = 11$ мэВ отношение $\frac{E_g}{m_c^*}$ соответствует набору параметров, наиболее точно воспроизводящему экспериментальный спектр. И в этом случае расчетная форма линии существенно отличается от экспериментальной. Таким образом, значения параметров энергетического спектра Бараффа оказались жестко и однозначно определенными экспериментальной формой линии (табл. 3). Используя значения параметров (табл. 3) модифицированного спектра Бараффа, определенные приближением расчетных магнитооптических спектров к экспериментальным, были построены зависимости энергетического положения нижнего уровня Ландау зоны проводимости (19) от величины магнитного поля при различных значениях волнового вектора ξ вдоль направления вектора индукции магнитного поля. Наличие ярко выраженных минимумов значений энергий уровней Ландау на рис. 7 и 8 можно объяснить только тем, что малое энергетическое расстояние между уровнями Ландау с $j = 0$ валентной зоны и зоны проводимости приводит к смешиванию волновых функций электронов валентной зоны и зоны проводимости, что, в свою очередь, приводит к взаимодействию между электронами, их заполняющими, поэтому появляется зависимость энергетического положения уровней Ландау с $j = 0$ от величины магнитного поля. Это предположение подтверждается тем, что при увеличении ξ расстояние между уровнями Ландау с $j = 0$ валентной зоны и зоны проводимости возрастает и минимумы становятся менее выраженными. Взаимодействие приводит к нарушению правил отбора для оптических межзонных и внутризонных переходов электронов. Действительно, рассчитанные во втором порядке теории возмущений матричные элементы оператора скорости для индуцированных электромагнитным излучением переходов электронов с участием уровней Ландау с $j = 0$ валентной зоны и зоны проводимости показали, что вероятности запрещенных переходов не равны нулю [9].

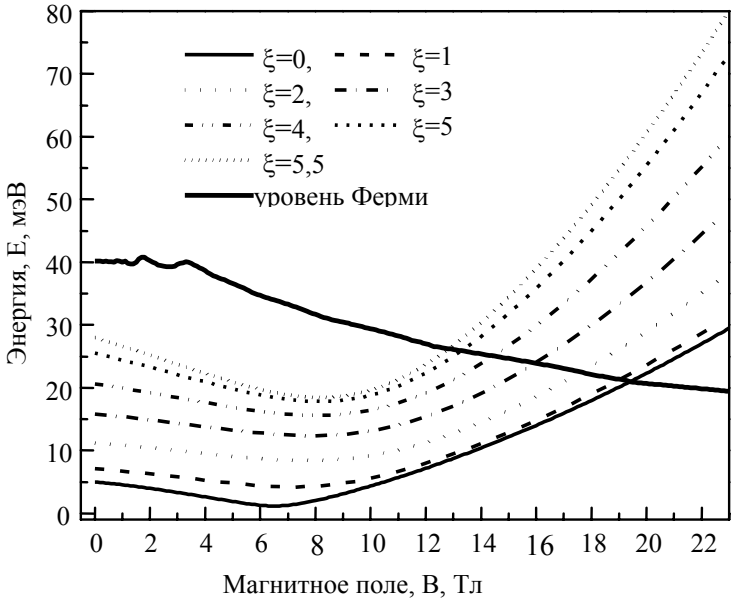

Рис. 8. Полевая зависимость нижнего уровня Ландау зоны проводимости для тяжелых биссекторных электронов при различных значениях приведенного волнового вектора

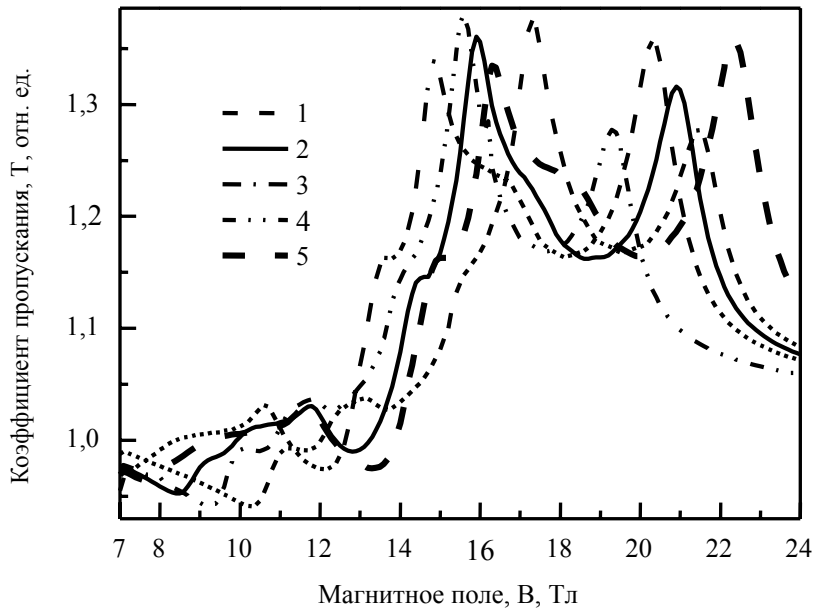

Рис. 9. Расчетные зависимости коэффициента пропускания полосковой линии от величины магнитного поля для ориентации, когда вектор индукции магнитного поля параллелен биссекторной оси.
1, 4 — $E_g = 9$ мэВ; *2* — $E_g = 10$ мэВ; *3, 5* — $E_g = 11$ мэВ.
Для графиков *4* и *5* отношение $\frac{E_g}{m_c^*}$ такое же, как и для случая *2*

Расчет полевых положений разрешенных и запрещенных переходов электронов между уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости совместно с моделированием формы экспериментальной линии приводит к выводу, что структуры при $B = 10$ Тл и $B = 17$ Тл на рис. 3 соответствуют запрещенным межзонным переходам, а особенность при $B = 14{,}5$ Тл соответствует запрещенному внутризонному переходу.

Выводы

Предложенный в данной работе метод исследования структуры электронного энергетического спектра позволил впервые в магнитооптическом эксперименте наблюдать осцилляции, связанные с межзонными переходами тяжелых бинарных и тригональных электронов.

Исследование межзонных переходов электронов на уровнях Ландау валентной зоны и зоны проводимости в ориентациях, когда вектор индукции внешнего магнитного поля $\vec{A}$ был параллелен биссекторной, бинарной и тригональной осям кристаллической решетки висмута, позволило впервые при температуре $T \geq 77$ К определить параметр $\frac{E_g}{m_c^*}$ для всех групп носителей заряда в точке L зоны Бриллюэна.

Метод моделирования формы линии магнитооптического эксперимента позволил получить полный набор параметров электронного энергетического спектра висмута в рамках модифицированной модели Бараффа, новые сведения о тензоре диэлектрической проницаемости висмута в инфракрасной области спектра, определить ширину запрещенной зоны при температуре $T \geq 77$ К и величины циклотронных масс электронов в точке L зоны Бриллюэна.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. *Иванов Г. А., Грабов В. М.* Физические свойства висмута // ФТП. 1995. Т. 29. № 5/6. С. 1040–1050.

2. *Кондаков О. В., Иванов К. Г., Собченко С. О.* Температурная зависимость магнитооптических осцилляций в висмуте // Деп. в ВИНИТИ. 27.12.00. № 3271-ВОО.

3. *Кондаков О. В.* Магнитооптический эффект в пределе малых квантовых чисел // Физика полупроводников и полуметаллов: Тез. докл. Всероссийской науч. конф. — СПб., 2002. С. 174–175.

4. *Иванов К. Г., Кондаков О. В.* Магнитооптический квантовый осцилляционный эффект в висмуте и сплавах висмут-сурьма // ФТТ. 1990. Т. 32. № 1. С. 290–291.

5. *Кондаков О. В., Костюченко О. А.* Алгоритм расчета формы линии магнитооптического эксперимента // Методология и методика непрерывного образования: Межвуз. сб. науч. тр. — Елец, 2001. С. 142–144.

6. *Vecchi M. P., Pereira J. R., Dresselhaus M. S.* Anomalies in the magnetoreflection spectrum of bismuth in the low-quantum-number limit // Phys. Rev. B. 1976. Vol. 4. № 2. P. 298–317.

7. *Blewitt R. L., Sievers A. J.* Magnetic-field-Induced Far-Infrared Transmission in Bismuth // Journal of Low Temperature Physics. 1973. Vol. 13. № 5/6. P. 617–669.

8. *Brown R. N., Mavroides J. G., Lax B.* Magnetoreflection in Bismuth // Phys. Rev. 1963. Vol. 129. № 5. P. 2055–2061.

9. *Кондаков О. В.* Междузонные переходы электронов в висмуте. — Елец, 2001.

V. Grabov, O. Kondakov

INTERZONE AND INTRAZONE MAGNETO-OPTICAL ELECTRON TRANSITIONS IN BISMUTH CRYSTALS

The spectrums magneto-transparence of a strip line from a single crystal of bismuth are experimentally researched at various directions of a magnetic displacement vector and wave vector of an electromagnetic radiation of the gas laser with a wavelength 10,6 microns in an impulse magnetic field up to 17 Tl at an interval of temperatures 80–300 K. New data are given for the parameters of energy distribution of charge carriers of L-extremums of zones in a modified Barraf model, cyclotron effective masses, tensor of inductivity of single crystals of bismuth in the infrared range.