

Здесь δf_k^{α} соответствует первому члену в (32), а $\delta f_k^{2\alpha}$ — второму. Используя выражение (35) для δf_k^{α} и формулы (3), (26) для тока, получим

$$j_1 = (4\pi/15) (eI/\hbar\Gamma_n) (\kappa\lambda/\omega) (Na^2/k_0) (\omega_c/\Gamma_n) [7e(\mathbf{be}) - 6\mathbf{b} - 5c(\mathbf{ce})(\mathbf{be})];$$

$$j_2 \approx \xi (eI/\hbar\Gamma_n) (k_0a)^2 (Na^2/k_0) (e^2/\hbar c)^3 (c\kappa/\omega) (\omega_c/\Gamma_n) \mathbf{b} + \dots \quad (36)$$

6. Для сравнения полученных результатов обозначим характерную величину тока, связанную с фотоионизацией с парамагнитными примесями, через $j_0 = \xi (e/\hbar c) (k_0a) (\kappa c/\omega) (eI/\hbar\Gamma_n)$. Фототок, обусловленный силой Лоренца, отличается от j_0 в параметр ω_c/Γ_n (7); фототок, связанный со спиновыми эффектами, — в $(Ze^2/\hbar c)^2 (ak_0)^{-1} (\omega_c/T)$ (27). При высоких температурах ($T > \Gamma_n$) доминирует обычный холловский ток, при низких $T \leq \omega_c$ — аномальный и спиновый вклад в ток, который для случая кристаллов с большим Z может составлять величину, сравнимую с обычным, не зависящим от магнитного поля фототоком. В случае рассеяния на примесях обычный холловский вклад имеет малость ω_c/Γ_n (9), а спиновый вклад отличается от него в параметр $(Ze^2/\hbar c)^2 (k_0a)^{-1} (m\Gamma_n/k_0^2)$ (36). Эти два механизма ФХЭ сравнимы по величине только при малых k_0 , т. е. на краю поглощения.

Автор благодарит В. К. Малиновского и Б. И. Стурмана за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Glass A. M., Von der Linde D., Auston D. H., Negran T. J. High-voltage bulk photovoltaic effect and photorefractive process in LiNbO₃.— "Appl. Phys. Lett.", 1974, vol. 25, p. 233; Excited state polarization and bulk photovoltaic effect.— "J. Elect. Mater.", 1975, vol. 4, N 5, p. 915.
2. Fridkin V. M., Grekov A. A., Ionov P. V., Rodin A. I., Savrenko E. A. and Verkhovskaya K. A. Photoconductivity in certain ferroelectrics.— "Ferroelectrics", 1974, vol. 8, p. 483.
3. Белиничер В. И., Малиновский В. К., Канаев И. Ф., Стурман Б. И. Фотондуцированные токи в сегнетоэлектриках.— «Автоматрия», 1976, вып. 4, с. 23.
4. Белиничер В. И., Малиновский В. К., Стурман Б. И. Фотогальванический эффект в кристаллах с полярной осью.— «ЖЭТФ», 1977, т. 73, с. 692.
5. Соколов А. В. Оптические свойства металлов. М., Физматгиз, 1961.
6. Белиничер В. И. Магнитооптические эффекты в ферромагнетиках и вид оператора тока.— «ФММ», 1977, т. 43, вып. 5, с. 903.
7. Вопросы квантовой теории необратимых процессов. Под ред. В. Л. Бонч-Бруевича. М., ИЛ, 1961.

Поступила в редакцию 17 августа 1977 г.

УДК 535.215.12

В. И. БЕЛИНИЧЕР, А. Н. ФИЛОНОВ

(Новосибирск)

МОДЕЛИ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ В ТЕОРИИ ФОТОГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

1. В работах [1] была предложена теория фотогальванического эффекта (ФГЭ) нового оптического явления, недавно обнаруженного экспериментально [2]. Фототок в [1] связывался с асимметрией вероятности ионизации и рекомбинации (АИР) электронов в зону проводимости.

сти. В этих работах рассматривалась модель отрицательно заряженного примесного центра. АИР учитывалась через искажение блоховских функций электрона в зоне проводимости дипольным потенциалом примесного центра. Такой метод расчета АИР непосредственно не применим к случаю нейтральной примеси, поскольку понятие дипольного момента не имеет смысла для потенциала заряженного центра. В настоящей работе показано, что для нахождения АИР в этом случае нужно учесть смешивание волновых функций электрона на примеси, обладающих противоположной четностью. Такое смешивание волновых функций имеет место в кристаллах без центра симметрии, т. е. в кристаллах, обладающих ФГЭ [2]. Однако даже при учете смешивания волновых функций для получения асимметрии необходим учет искажения блоховской функции в зоне проводимости. Искажение при этом может быть обусловлено симметричным потенциалом. Мы рассчитали искажение волновых функций по теории возмущений (при учете смешивания), обусловленное короткодействующим симметричным потенциалом и кулоновским потенциалом, что позволило получить фототок для этих моделей. Для случая мелких нейтральных примесных уровней нами произведен расчет АИР и фототока точно, без использования теории возмущений для функций электрона в зоне проводимости.

2. Электрический ток j можно выразить через функцию распределения электронов в зоне проводимости f_k в виде интеграла по квазиимпульсу

$$j = \frac{e\hbar}{m} \int \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} f_k d^3k, \quad (1)$$

где $\varepsilon(k)$ — закон дисперсии электронов. На равновесной f_k^0 ток (1) обращается в нуль, поэтому для нахождения фототока необходимо вычислить неравновесную асимметричную поправку к функции распределения электронов δf_k^{as} . Как показано в [1], δf_k^{as} следующим образом выражается через полную вероятность ионизации I_k^n и рекомбинации I_k^p :

$$\delta f_k^{as} = \Gamma_n^{-1} (I_k^n + I_k^p)^{as} \quad (2)$$

(Γ_n^{-1} — характерное время изотропизации электронов по импульсу). В случае бесфононных процессов величины I_k^n , I_k^p следующим образом выражаются через плотность вероятности ионизации W_α^k :

$$I_k^n = \frac{N_0}{2} \sum_\alpha \int W_\alpha^n(k) J_\alpha(q) d^3q; \quad (3)$$

$$I_k^p = \frac{N_0}{2} \sum_\alpha \int f_k W_\alpha^n(-k) d^3q.$$

Здесь $J_\alpha(q)$ — плотность числа фотонов с импульсом q и поляризацией α ; N_0 — концентрация примесей, которые мы считаем наполовину свободными. Плотность вероятности $W_\alpha^n(k)$ имеет вид

$$W_k^n = \frac{\omega}{2\pi} |\langle k - |De|0\rangle|^2 \delta(\varepsilon_k + \Delta - \hbar\omega), \quad (4)$$

где D — дипольный момент, Δ — глубина залегания примеси: $\Delta \sim \hbar\omega \gg \varepsilon_k$. В силу свойства симметрии блоховских функций $u_k(x) = u_{-k}^*(x)$ квадрат модуля матричного элемента $|D_k e|^2$ для блоховской функции симметричен: $|D_k e|^2 = |D_{-k} e|^2$, поэтому необходимо учесть искажения блоховской функции. Мы произведем расчет для малых k : $ka \ll 1$, где a — характер-

$$u_k(x) = \chi(x) + ikx\varphi(x). \quad (5)$$

Матричные элементы дипольного момента для функций χ , φ могут быть записаны в виде

$$\langle \chi | \mathbf{D}e | 0 \rangle = f(ce); \quad i \langle \varphi | (kx) \mathbf{D}e | 0 \rangle = i(ke)ga. \quad (6)$$

Формула (6) и выражает наличие у кристалла выделенного направления $c: \mathbf{D}_{-k} \neq \mathbf{D}_k$. Поправка к блоховской функции $u_k(x)$, приводящая к АИР, учитывает только полюсный вклад в ряду теории возмущений:

$$\delta u_k^-(x) = -i\pi \int \langle k' | V | k \rangle \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) u_{k'}(x) d^3k'. \quad (7)$$

Величина $\delta u_k^-(x)$ в случае короткодействующего потенциала $V_{\text{кор}} = (2\pi/m)a\delta^3(r)$ и кулоновского потенциала $V_{\text{кул}} = -e^2/\varepsilon_0 r$ имеет вид

$$\begin{aligned} (\delta u_k)_{\text{кор}} &= iak\chi^2(0)\chi(x); \\ (\delta u_k)_{\text{кул}} &= i(e^2m/2\varepsilon_0k) [(\chi(x) + i(kx)\varphi(x)) \ln(4k^2\rho^2) - i(kx)\varphi(x)]. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь ρ — радиус экранирования кулоновского потенциала, ε_0 — диэлектрическая постоянная. Воспользовавшись формулой (6), легко вычислить квадрат модуля матричного элемента дипольного момента. В низшем порядке по возмущению имеем

$$|\mathbf{D}e|^2 = f^2(ce)^2 + (ke)^2 a^2 g^2 + 2(ke)fg \begin{cases} ak\chi^2(0) - \text{кор}; \\ \frac{e^2m}{2k} - \text{кул}. \end{cases} \quad (9)$$

Формула (9) показывает интересную особенность несмотря на то, что поправка к волновой функции $(\delta u_k)_{\text{кул}}$ зависит от радиуса экранирования ρ , а физически наблюдаемая величина $|\mathbf{D}e|^2$ от ρ не зависит. Воспользовавшись формулами (1), (3), (8), можно вычислить ток

$$\mathbf{j} = \left(\frac{eI}{\hbar\Gamma_{\text{и}}} \right) \left(\frac{kx}{m\omega} \right) (ka) \frac{e(ce)fg}{3f^2(ce)^2 + k_0^2 a^2 g^2} \begin{cases} k_0 a \left(1 - \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \eta \frac{k_T}{k_0} \right) - \text{кор}; \\ \frac{e^2m}{2k_0\varepsilon_0} \left(1 - \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \eta \frac{k_0}{k_T} \right) - \text{кул}. \end{cases} \quad (10)$$

Здесь $k_T = (mT)^{1/2}$ — характерный тепловой импульс, κ — коэффициент поглощения:

$$\kappa = (2k_0 m \omega N_0 / 3c\hbar^2) (3f^2(ce)^2 + a^2 k_0^2 g^2), \quad (11)$$

$\eta = \chi/\chi_T$, χ_T — коэффициент поглощения, усредненный по максвелловской функции распределения.

3. Мелкие нейтральные примеси в кристалле можно хорошо описывать в приближении эффективной массы, а электроны,двигающиеся в поле заряженного центра, рассматривать как свободные. Это приближение является хорошим в том случае, если боровский радиус примеси $a_0 = \varepsilon_0 \hbar^2 / me^2$ намного больше размеров элементарной ячейки кристалла, что реализуется для больших ε_0 и маленьких эффективных масс. Мы произведем расчет АИР в этой модели точно, используя кулоновские волновые функции непрерывного спектра. Отсутствие у кристалла центра симметрии приводит к тому, что основное состояние электрона на примеси не обладает определенной четностью. Будем предполагать что это состояние является смесью s и p водородоподобных волновых функций [3]:

$$\psi_0 = \pi^{-1/2} (e^{-r} + \xi (cr/2)^2 e^{-r/2}); \quad \xi \ll 1. \quad (12)$$

Боровский радиус a_0 в нашей системе единиц положен равным единице. При вычислении матричных элементов дипольного момента D_k кулоновские волновые функции непрерывного спектра, нумеруемые импульсом k , удобно представить в виде разложения по сферическим гармоникам [3]:

$$\psi_k^-(x) = \sum_{l=0}^{\infty} (i)^l \Gamma(1+l+i/k) R_{kl}(r) P_l\left(\frac{kr}{kr}\right). \quad (13)$$

Здесь $P_l(Z)$ — полиномы Лежандра; $R_{kl}(r)$ — радиальные кулоновские функции, которые являются действительными [3]. Легко видеть, что в соответствии с правилами отбора для дипольного излучения в матричный элемент дипольного момента D между волновыми функциями (12), (13) дают вклад только первые три члена в разложении (12) для $\psi_k^-(x)$:

$$(De) = \frac{4\sqrt{\pi}}{3k^2} \Gamma(1+i/k) e^{\pi/2k} \left\{ i(ek)(k+i)y_1 + \frac{\xi}{10\sqrt{2}} \left[(ce)(5k^2y_0 + (2k^2 - 3ik - 1)y_2) - \frac{3}{k^2} (ke)^2 (2k^2 - 3ik - 1)y_2 \right] \right\}. \quad (14)$$

Здесь константы y_0, y_1, y_2 являются действительными функциями k и следующим образом выражаются через интегралы от радиальных кулоновских функций R_{kl} :

$$\begin{aligned} y_0 &= \int_0^{\infty} R_{k0} r^4 e^{-r/2} dr; \\ y_1 &= \int_0^{\infty} R_{k1} r^4 e^{-r} dr; \\ y_2 &= \int_0^{\infty} R_{k2} r^6 e^{-r/2} dr. \end{aligned} \quad (15)$$

Интегралы (15) берутся в элементарных функциях:

$$\begin{aligned} y_0 &= \frac{2^8}{(1+4k^2)^3} \left(\frac{1-2ik}{1+2ik} \right)^{-i/k}; \\ y_1 &= \frac{12k}{(1+k^2)^3} \left(\frac{1-ik}{1+ik} \right)^{-i/k}; \\ y_2 &= \frac{20k^2}{(1+4k^2)} y_0. \end{aligned}$$

Комбинируя формулы (1), (3), (14), (15), получим явное выражение для тока ионизации

$$\begin{aligned} j_{\Pi} &= \left(\frac{eI}{\hbar\Gamma_{\Pi}} \right) \frac{\kappa}{\omega m} \frac{|\overline{De}|^2 k}{|De|^2} = \left(\frac{eI}{\hbar\Gamma_{\Pi}} \right) \left(\frac{\kappa k}{\omega m} \right) \frac{32\sqrt{2}}{5} \times \\ &\times \frac{k^2(1+k^2)^2}{(1+4k^2)^3} \left(\frac{1+2k^2-ik}{1+2k^2+ik} \right)^{-i/k} (4c + 3e(ce)). \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь черта означает усреднение по углам, коэффициент поглощения κ имеет вид

$$\kappa = \frac{2^{11}\pi^2}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{m\omega a_0}{\hbar} \right) (N_0 a_0^3) \frac{(1+k^2)^{-5}}{(1-\exp(-2\pi/k))} \left(\frac{1-ik}{1+ik} \right)^{-2i/k}. \quad (17)$$

Ток рекомбинации дается формулой

$$j_{\text{P}} = - \left(\frac{eI}{\hbar\Gamma_{\Pi}} \right) \frac{\kappa}{m\omega} \frac{|\overline{D_{ke}}|^2 k}{|D_{ke}|^2} \quad (18)$$

(двойная черта означает усреднение по поляризации и интегрирование

по k с весом $\exp(-k^2/2mt)$). Точное вычисление j_p затруднительно, однако оценка легко может быть получена заменой $k \rightarrow k_r$.

Сравнивая характерную величину токов, полученную в этой работе — (10), (16), с результатами [1], видим, что токи имеют один и тот же порядок величины. Модели примесей, использованные в настоящей работе, позволяют рассчитать эффект в кристалле без центра симметрии, не обладающем полярной осью. В соответствии с [4] здесь необходим учет октупольного момента для электрона на примеси. Фототок можно также получить в явном виде, но формулы имеют более громоздкий вид.

Авторы благодарят В. К. Малиновского за полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Белиничер В. И., Малиновский В. К., Канаев И. Ф., Стурман Б. И. Фотоиндуцированные токи в сегнетоэлектриках.— «Автометрия», 1976, № 4, с. 23; Белиничер В. И., Малиновский В. К., Стурман Б. И. Фотогальванический эффект в кристаллах с полярной осью.— «ЖЭТФ», 1977, т. 73, с. 692.
2. Glass A. M., Von der Linde D., Negran T. J. High-voltage bulk photovoltaic effect and photorefractive process in LiNbO_3 .— "Appl. Phys. Lett.", 1974, vol. 25, p. 233; Glass A. M., Von der Linde D., Negran T. J. Excited state polarization and bulk photovoltaic effect.— "J. Electron Materials", 1975, vol. 4, p. 915.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. П. Квантовая механика. М., ФМ, 1974.
4. Baskin E. M., Blokh M. D., Entin M. V., Magarill L. I. Current quadratic in field and photogalvanic effect in crystals without inversion center.— "Phys. Stat. Sol. B", 1977, vol. 83, p. 97.

Поступила в редакцию 17 августа 1977 г.

УДК 548.3 : 534.01

К. С. АЛЕКСАНДРОВ, А. Т. АНИСТРАТОВ, Б. В. БЕЗНОСИКОВ

(Красноярск)

АКУСТООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ABCl_3

При выборе материалов для акустооптических систем управления лазерными пучками обычно руководствуются критериями качества [1], определяемыми показателем преломления, фотоупругой постоянной, плотностью и скоростью распространения упругой волны. Среди известных к настоящему времени кристаллов наибольшей эффективностью обладают окисные соединения: молибдат свинца, йодоватая кислота и парателлурит [2]. Однако диапазон прозрачности перечисленных соединений ограничен, а получение крупных и бездефектных монокристаллов — довольно сложная технологическая проблема. Эти обстоятельства значительно сужают область применений окисных кристаллов и стимулируют поиск новых акустооптических материалов.

В последние годы в нашей лаборатории выращен ряд хлоридов принадлежащих довольно обширному семейству, с общей формулой ABCl_3 (А — одновалентный, В — двухвалентный металлы) [3]. На отдельных представителях этого ряда были проведены измерения границ прозрачности, дисперсии показателей преломления в видимой области [4], температурных зависимостей двупреломления [5] и скоростей распространения упругих волн [6, 7]. Изучалось влияние малых добавок Са, Sr, Cd на температуры фазовых переходов и свойства кристаллов [5]. Представляет интерес, опираясь на эти данные, проанализировать основные тенденции изменений характеристик, определяющих критерии акустооптической эффективности семейства ABCl_3 , с целью выявления кристаллов, потенциально перспективных для использования в практических устройствах.