

Оптические переходы между состояниями акцепторов в одноосно сжатом германии

Д. В. Козлов¹⁾

Институт физики микроструктур РАН, 603950 Нижний Новгород, ГСП-105, Россия

Поступила в редакцию 18 января 2007 г.

Рассчитаны зависимости энергий нечетных возбужденных состояний мелких акцепторов в одноосно сжатом германии от величины деформации и силы осцилляторов для переходов на эти состояния с основного состояния примеси. Расчет позволил детально интерпретировать наблюдаемые ранее линии в спектрах фотопроводимости и поглощения одноосно сжатого германия и описать эволюцию этих линий при увеличении деформации. Показано, что фотопроводимость германия при наличии одноосного сжатия зависит от поляризации падающего электромагнитного излучения.

PACS: 71.23.An, 71.55.-i, 71.70.Fk

Интерес к состояниям акцепторов в одноосно сжатом германии возник благодаря обнаружению генерации стимулированного терагерцового излучения на переходах с резонансных состояний в одноосно сжатом *p*-Ge при температуре жидкого гелия [1, 2]. В работах [3–5] различными методами рассчитаны энергии резонансных состояний акцепторов в одноосно сжатом *p*-Ge. Изучена эволюция спектра акцепторных состояний, относящихся к различным дырочным подзонам при увеличении одноосной деформации. Было показано, что примесные уровни, относящиеся к верхней, отщепленной одноосным сжатием, подзоне, с ростом давления выходят в непрерывный спектр нижней подзоны. При большой величине давления, то есть когда расщепление краев подзон значительно превосходит энергию связи акцепторов, резонансные уровни группируются вблизи края верхней отщепленной дырочной подзоны [3–5].

Энергии резонансных состояний мелких акцепторов в полупроводниках и полупроводниковых структурах определялись экспериментально по положению особенностей в спектрах фотопроводимости или поглощения, связанных с переходами на эти состояния с основного примесного уровня [6–9]. Так были определены энергии резонансных состояний бора в кремнии [6, 7], где акцепторные уровни, связанные со спин-отщепленной подзоной, оказываются в непрерывном спектре нижних подзон легких и тяжелых дырок и энергии резонансных состояний мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi с квантовыми ямами, где примесные уровни, относящиеся к верхним подзонам размерного квантования, оказываются в непрерывном спектре нижней подзоны [8, 9]. Отме-

чу, что в этих случаях положения резонансных состояний акцепторов оказывались близки к краям верхних подзон.

Спектры фотопроводимости и поглощения одноосно сжатого Ge, легированного галлием, представлены в работах [10, 11]. Измеренные в этих работах спектры фотопроводимости образцов Ge состоят из двух широких полос. Длинноволновая полоса образована оптическими переходами с основного акцепторного уровня в нижнюю подзону (в подзону легких дырок); она медленно смещается в область низких частот с ростом одноосной деформации. Коротковолновая полоса (значительно более слабая) образована переходами в верхнюю дырочную подзону. Длинноволновый край этой полосы линейно смещается с ростом деформации кристалла Ge в область высоких частот, что согласуется с предсказанной теорией линейной зависимостью расщепления дырочных подзон от величины деформации [10, 11]. Согласно расчетам [3–5], вблизи этого длинноволнового края должны присутствовать особенности, связанные с переходами с основного акцепторного состояния на резонансные уровни, относящиеся к верхней, отщепленной давлением дырочной подзоне. Однако в работах [10, 11] в измеренных спектрах не удалось обнаружить каких-либо признаков спектральных линий слева от коротковолновой полосы поглощения, которые можно было бы связать с переходами с основного состояния акцептора на резонансные примесные состояния, связанные с отщепленной зоной, что, возможно, связано с неоднородностью деформации и размытием линий.

В работе [11] также детально изучен край длинноволновой полосы поглощения одноосно сжатого германия, образованный переходами на возбужденные

¹⁾e-mail: dvkoz@ipm.sci-nnov.ru

состояния акцепторов вблизи края нижней подзоны. На рис.1 символами представлены положения особен-

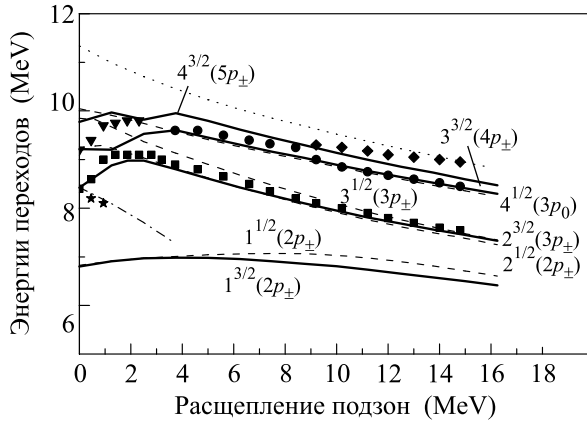


Рис.1. Зависимости энергий переходов между основным и возбужденными состояниями акцепторов в одноосно сжатом вдоль направления (111) германии от величины расщепления краев дырочных подзон. Сплошные линии показывают энергии переходов с основного состояния на уровни, соответствующие проекции полного момента на ось z $J = \pm 3/2$ (линии $1^{3/2}$ - $4^{3/2}$), штриховые – энергии переходов на уровни, соответствующие проекции момента $J = \pm 1/2$ (линии $1^{1/2}$ - $4^{1/2}$), пунктирная линия соответствует краю поглощения, связанного с возбуждением в континуум. В скобках после номера линии указаны состояния водородоподобного спектра, на который “выходит” конечное состояние соответствующего перехода при больших значениях сжатия. Штрихпунктирной линией представлен переход с уровня, отщепившегося от основного состояния, на нижний уровень, соответствующий проекции полного момента импульса на ось z $J = \pm 5/2$. Символами представлены положения особенностей в спектрах примесного поглощения одноосно сжатого германия из работы [11]

ностей в спектрах примесного поглощения одноосно сжатого вдоль направления (111) Ge:Ga при различных величинах расщепления краев подзон легких и тяжелых дырок из работы [11]. Известно, что самые сильные линии в спектре примесного поглощения недеформированного объемного дырочного германия соответствуют переходам на второй (состояние $2\Gamma_8^-$, D -линия) и третий (состояния $3\Gamma_8^-$ и $1\Gamma_7^-$, C -линия) возбужденные p -подобные уровни [12]. Переход на нижнее возбужденное состояние $1\Gamma_8^-$ (G -линия) оказывается на порядок слабее. Мощные D - и C -линии доминируют и в представленном в [11] спектре (квадраты и треугольники на рис.1 соответственно). При приложении давления в спектре по-прежнему доминирует линия D (квадраты). Звездочками на рис.1 отмечена особенность, отщепляющаяся от линии D при приложении давления. Эта

особенность смещается в область низких частот с ростом величины одноосной деформации, и ее интенсивность быстро падает. Интенсивность линии C (треугольники на рис.1) с ростом давления также падает, и при деформации, соответствующей расщеплению краев подзон, 2.4 мэВ становится неразличимой в спектре. При дальнейшем увеличении деформации в спектре поглощения снова появляется коротковолновая линия (кружки на рис.1), от которой при расщеплении краев подзон около 9 мэВ отщепляется слабая коротковолновая особенность (ромбы на рис.1). Авторы [11] утверждают, что эта особенность соответствует переходу на резонансный акцепторный уровень, выходящий с континуума нижней подзоны. Это означает, что резонансное состояние после выхода в континуум остается около его края при увеличении деформации. Отмечу, что такой неожиданный результат противоречит теоретическим оценкам энергий резонансных состояний акцепторов в одноосно деформированном германии [3–5]. В связи с этим возникла необходимость детальных расчетов спектра возбужденных состояний акцепторов в одноосно сжатом германии и сил осцилляторов оптических переходов на эти состояния с основного уровня.

При расчете энергий и волновых функций акцепторов использовалось приближение эффективной массы. Гамильтониан уравнения Шредингера для огибающих волновых функций включал в себя гамильтониан Латтинжера, член, связанный с деформацией и кулоновский потенциал. Использовалось аксиальное приближение, то есть закон дисперсии дырок полагался изотропным в плоскости, перпендикулярной оси деформации. Для этого в недиагональных элементах гамильтониана Латтинжера, как и в работе [8], были опущены слагаемые, пропорциональные $(\gamma_2 - \gamma_3)$ ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – параметры Латтинжера). В аксиальном приближении сохраняется проекция полного момента J на ось деформации (ось z) и спектр акцептора оказывается двукратно вырожденным по знаку этой проекции (то есть $\pm J$).

Отмечу, что ранее акцепторные состояния в одноосно деформированном германии рассчитывались вариационными методами [12]. Расчет вероятностей оптических переходов между состояниями акцепторов в таком материале до настоящего времени не проводился.

При этом выражения для вероятностей поглощения квантов излучения в единицу времени для переходов между акцепторными состояниями имеют вид

$$W_{g \rightarrow i} = \frac{\pi(eE)^2}{\hbar} |\langle \Psi_g(J) | x \pm iy | \Psi_i(J \pm 1) \rangle|^2 \quad (1)$$

для волны, распространяющейся вдоль оси деформации (x -поляризация), и

$$W_{g \rightarrow i} = \frac{2\pi(e\mathbf{E})^2}{\hbar} |\langle \Psi_g(J) | z | \Psi_i(J) \rangle|^2 \quad (2)$$

для волны, распространяющейся перпендикулярно оси деформации и поляризованной вдоль оси деформации (z -поляризация), где \mathbf{E} – амплитуда электрического поля электромагнитной волны.

При одноосном сжатии основное состояние акцепторов в германии соответствует проекции полного момента импульса на ось z $J = \pm 1/2$. Из выражений (1), (2) следует, что с такого уровня разрешены переходы на состояния, соответствующие проекции момента импульса на ось z $J = \pm 1/2$ (при любой поляризации электромагнитного излучения) и $\pm 3/2$ (при x -поляризации). Зависимость энергий квантов этих разрешенных в аксиальном приближении переходов представлена сплошными и штриховыми линиями на рис.1. Отмечу, что при учете анизотропии эти правила отбора становятся нестрогими, однако, поскольку влияние анизотропии на энергию и волновые функции акцепторов в германии незначительно [3], силы осцилляторов для переходов, запрещенных в аксиальном приближении, должны быть малы. Таким образом, в спектре поглощения должны быть существенны только особенности, связанные с переходами, представленными на рис.1.

Штрихпунктирной линией на рис.1 представлен переход с уровня, отщепившегося от основного состояния на нижний возбужденный уровень, соответствующий проекции полного момента импульса на ось z , $J = \pm 5/2$. Энергия этого перехода соответствует положению длинноволновой особенности, отщепившейся от D -линии (звездочки на рис.1). Поскольку с ростом давления населенность верхнего уровня, отщепившегося от основного состояния, уменьшается, интенсивность такого перехода должна быстро падать.

При больших значениях деформации, то есть когда расщепление краев дырочных подзон значительно превышает энергию ионизации, каждая из расщепившихся подзон и связанные с ней примесные уровни могут рассматриваться независимо [13]. Спектр носителей становится водородоподобным. В таком спектре должны доминировать линии, связанные с переходами на состояния $2p_{\pm}$ и $2p_0$.

На рис.2 представлены рассчитанные силы осцилляторов переходов на нижние возбужденные состояния ($f_i = W_{g \rightarrow i} / \sum_{j=1}^N W_{g \rightarrow j}$, где N – полное число найденных состояний) под действием электромагнитной волны, распространяющейся параллельно

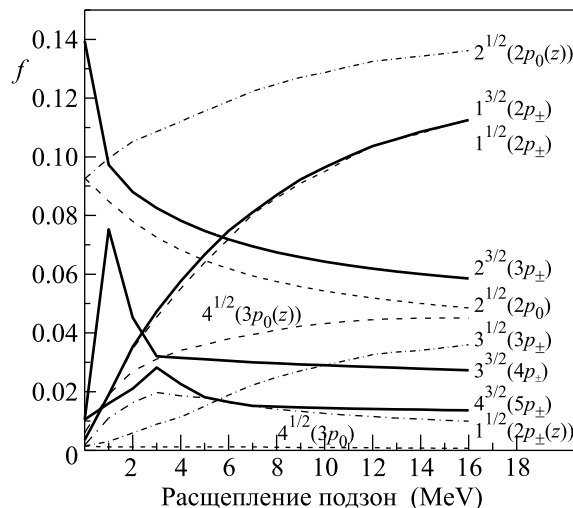


Рис.2. Силы осцилляторов для переходов с основного акцепторного уровня под действием x -поляризованной волны (сплошные и штриховые линии) и z -поляризованной волны (штрихпунктирные линии) в зависимости от величины расщепления подзон. Обозначения кривых соответствуют обозначениям на рис.1. Кривые, соответствующие переходам под действием z -поляризованной волны, помечены (z)

(сплошные и штриховые линии) и перпендикулярно (штрихпунктирные кривые) оси деформации. Обозначения переходов совпадают с обозначениями на рис.1.

Из рис.1 видно, что наблюдаемая мощная длинноволновая линия в [11] (квадраты на рис.1) может быть образована переходами на состояния $2^{3/2}$, $2^{1/2}$ и $3^{1/2}$, разница энергий которых значительно меньше характерной ширины линий поглощения, представленных в [11] (0.6 мэВ). Из рис.2 видно, что переходы на эти уровни должны быть интенсивными и доминировать в спектре поглощения одноосно сжатого германия. Средняя линия в спектре поглощения, измеренном в [11] (кружки на рис.1), интенсивность которой растет с ростом величины деформации [11], может быть связана с переходом на состояние $4^{1/2}$, который совпадает по положению в спектре с измеренной линией (см. рис.1) и интенсивность которого также увеличивается с ростом величины сжатия (см. рис.2). Коротковолновая линия поглощения (ромбы на рис.1) может быть связана с возбуждением носителей в непрерывный спектр и на очень мелкие акцепторные уровни. Таким образом, вывод авторов [11] о том, что некоторые, наблюдаемые в спектре поглощения, линии связаны с переходами на резонансные уровни, находящиеся вблизи края нижней подзоны, не подтверждается.

Отмечу, что спектры поглощения и фотопроводимости, представленные в [11], измерены при энергиях квантов падающего излучения более 7 мэВ. Естественно, в таких спектрах не представлен переход на самые нижние возбужденные состояния (G -линия в недеформированном германии). Эта линия в спектре недеформированного материала очень слабая, однако ее интенсивность растет для x -поляризованной волны (см. рис.2 – переходы на состояния $1^{1/2}$ и $1^{3/2}$) и при больших значениях одноосного сжатия эта линия начинает доминировать в спектре поглощения. В спектре поглощения z -поляризованной волны линия G остается слабой (см. рис.2). Таким образом, спектры поглощения, фотопроводимости, а также и электролюминесценции одноосно сжатого германия должны существенно меняться при изменении поляризации излучения: при x -поляризации в длинноволновой части спектра должна присутствовать мощная линия G . Этот эффект в спектрах электролюминесценции одноосно сжатого германия наблюдался в работе [14].

Автор благодарен В.И. Гавриленко за полезные обсуждения и помощь в работе.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты # 05-02-17341, # 04-02-17178), BRHE (# Y2-P-01-08), Фонда содействия отечественной науке и гранта Президента России МК-1860.2005.02.

1. И. В. Алтухов, М. С. Каган, В. П. Синис, Письма в ЖЭТФ, **47**, 136 (1988).
2. И. В. Алтухов, М. С. Каган, К. А. Королев и др., ЖЭТФ **101**, 756 (1992).
3. В. Я. Алешкин, В. И. Гавриленко, Д. В. Козлов, ЖЭТФ **120**, 1495 (2001).
4. И. В. Алтухов, М. С. Каган, К. А. Королев и др., ЖЭТФ **115**, 89 (1999).
5. М. А. Одноблюдов, А. А. Прокофьев, И. Н. Ясиевич, ЖЭТФ **121**, 692 (2002).
6. A. Onton, P. Fisher, and A. K. Ramdas, Phys. Rev. **163**, 686 (1967).
7. A. K. Ramdas and S. Rodrigueuz, Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981).
8. В. Я. Алешкин, Б. А. Андреев, В. И. Гавриленко и др., ФТП **34**, 582 (2000).
9. V. Ya. Aleshkin, B. A. Andreev, V. I. Gavrilenko et al., Nanotechnology **11**, 348 (2000).
10. V. Y. Aleshkin, A. V. Gavrilenko, V. I. Gavrilenko et al., Phys. Status Solidi (c) **0**, 680 (2003).
11. Я. Е. Покровский, Н. А. Хвальковский, ФТП **39**, 197 (2005).
12. J. Broeckx and J. Vennik, Phys. Rev. B **35**, 6165 (1987).
13. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, М.: Наука, 1972.
14. А. В. Андриянов, А. О. Захарьин, И. Н. Ясиевич, Н. Н. Зиговьев, Письма в ЖЭТФ **83**, 410 (2006).