

©1995 г.

РОЛЬ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ В ПЬЕЗОСПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ СВОЙСТВАХ АКЦЕПТОРА Sn_{As} В GaAs

И.В.Костин, Е.Б.Осипов, Н.А.Осипова, Н.О.Сорокина

Череповецкий государственный педагогический институт
им. А.В. Луначарского,
162600, Череповец, Россия
(Получена 4 мая 1994 г. Принята к печати 21 сентября 1994 г.)

Предложено объяснение наблюдаемой в эксперименте нелинейной зависимости от давления частоты люминесцентного излучения, возникающего при переходах электронов со дна зоны проводимости на основной уровень акцептора Sn_{As} в GaAs. Согласно положенной в основу расчетов модели замещение мышьяка атомом олова в GaAs ведет к образованию в запрещенной зоне полупроводника двух близко расположенных Γ_8 -уровней — основного и возбужденного, взаимодействие которых при одноосной деформации определяет нелинейный характер зависимости их энергий и частоты люминесцентного излучения от давления. Приведены расчетные зависимости энергии кванта люминесцентного излучения от давления в случае деформаций вдоль осей [001], [111] и [110]. Из сопоставления с экспериментальными данными определены отношения γ^2/Δ и δ^2/Δ , где Δ — расстояние между основным и возбужденным Γ_8 -уровнями в отсутствие деформации; γ и δ — константы, характеризующие взаимодействие между подуровнями основного и возбужденного состояний при $P \parallel [001]$ и $P \parallel [111]$ соответственно. В рамках описанной модели рассчитаны зависимости поляризационного отношения от давления для случаев $P \parallel [001]$, $P \parallel [111]$, $P \parallel [110]$ — наблюдается согласие с экспериментом.

При замещении в кристалле GaAs атома мышьяка атомом олова в запрещенной зоне полупроводника возникает акцепторный уровень, который, как показано в [1], расщепляется одноосной деформацией на два подуровня, а магнитным полем на четыре, т.е. является четырехкратно вырожденным Γ_8 -уровнем с энергией связи порядка 0.17 эВ. Предположение об образовании в запрещенной зоне только одного Γ_8 -уровня приводит к линейной зависимости от давления частоты люминесцентного излучения, обусловленного переходами электронов со дна зоны проводимости на основной подуровень расщепленного деформацией акцепторного уровня. Между тем экспериментальные данные [1] указывают на нелинейный характер зависимости. Это связано с нелинейностью движения примесного уровня в поле внешней деформации, объяснение которой, очевидно, следует искать в существовании наряду с данным Γ_8 -уровнем другого, возбужденного, достаточно близко лежащего к основному.

В частности, нелинейный характер зависимости от давления частоты люминесцентного излучения может быть объяснен обменным взаимодействием частиц, связанных на центре [2]. Возбужденный уровень не может являться Γ_6 - или Γ_7 -уровнем, так как в этом случае приложение внешней одноосной деформации приводило бы к нелинейной зависимости от давления и величины расщепления основного состояния, что противоречит экспериментальным данным [1]. Поэтому в основу исследований была положена модель, предполагающая возникновение двух акцепторных Γ_8 -уровней при легировании GaAs оловом, основного и возбужденного, расстояние между которыми при давлении $P = 0$ равно Δ . Внешнее давление расщепляет каждый из них на два двукратно вырожденных подуровня. Взаимодействие подуровней определяет нелинейную зависимость их энергий от давления с сохранением линейности расщепления в квадратичном по деформации приближении.

Учтя перепутывание основного и возбужденного состояний, запишем матрицу гамильтониана дырки, имеющей два близко лежащих Γ_8 -уровня, в поле деформации, например, для $P \parallel [001]$:

	$\frac{3}{2} \frac{3}{2}$	$\frac{3}{2} \frac{1}{2}$	$\frac{3}{2} -\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2} -\frac{3}{2}$	$\frac{3'}{2} \frac{3}{2}$	$\frac{3'}{2} \frac{1}{2}$	$\frac{3'}{2} -\frac{1}{2}$	$\frac{3'}{2} -\frac{3}{2}$
$\frac{3}{2} \frac{3}{2}$	$b_1 \varepsilon_1$	0	0	0	$\gamma \varepsilon_1$	0	0	0
$\frac{3}{2} \frac{1}{2}$	0	$-b_1 \varepsilon_1$	0	0	0	$-\gamma \varepsilon_1$	0	0
$\frac{3}{2} -\frac{1}{2}$	0	0	$-b_1 \varepsilon_1$	0	0	0	$-\gamma \varepsilon_1$	0
$\frac{3}{2} -\frac{3}{2}$	0	0	0	$b_1 \varepsilon_1$	0	0	0	$\gamma \varepsilon_1$
$\frac{3'}{2} \frac{3}{2}$	$\gamma \varepsilon_1$	0	0	0	$\Delta + b_2 \varepsilon_1$	0	0	0
$\frac{3'}{2} \frac{1}{2}$	0	$-\gamma \varepsilon_1$	0	0	0	$\Delta - b_2 \varepsilon_1$	0	0
$\frac{3'}{2} -\frac{1}{2}$	0	0	$-\gamma \varepsilon_1$	0	0	0	$\Delta - b_2 \varepsilon_1$	0
$\frac{3'}{2} -\frac{3}{2}$	0	0	0	$\gamma \varepsilon_1$	0	0	0	$\Delta + b_2 \varepsilon_1$

Здесь b_1 и b_2 — константы деформационного потенциала основного и возбужденного состояний, γ — константа, характеризующая взаимодействие подуровней в поле деформации, $\varepsilon_1 = \varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx} = P/(c_{11} - c_{12})$. Считая элементы матрицы гамильтониана, пропорциональные деформации, величинами первого порядка малости (по сравнению с Δ , имеющей нулевой порядок), можно с помощью стандартной теории возмущений для вырожденных состояний с учетом переходов в состояния с другими энергиями [3] получить следующие выражения для сдвига и расщепления основного Γ_8 -уровня:

$$E_{1,2} = \pm b_1 \varepsilon_1 - \gamma^2 \varepsilon_1' / \Delta. \quad (2)$$

Для $P \parallel [111]$ и $P \parallel [110]$ соответственно имеем

$$E_{1,2} = \pm \sqrt{3} d_1 \varepsilon_{xy} - 3 \delta^2 \varepsilon_{xy}^2 / \Delta, \quad \varepsilon_{xy} = P/6c_{44}, \quad (3)$$

и

$$E_{1,2} = \pm \sqrt{b_1^2 \varepsilon_1^2 + d_1^2 \varepsilon_{xy}^2} - \delta^2 \varepsilon_{xy}^2 / \Delta - \gamma^2 \varepsilon_1^2 / \Delta, \\ \varepsilon_1 = -P/2(c_{11} - c_{12}), \quad \varepsilon_{xy} = P/4c_{44}. \quad (4)$$

В формулах (2)–(4) c_{11} , c_{12} , c_{44} — упругие модули, d_1 , δ — константы деформированного потенциала, описывающие расщепление основного и взаимодействие основного и возбужденного уровней при $P \parallel [111]$. Из выражений (2)–(4), полученных в квадратичном по ε приближении, видно, что добавки к энергиям расщепленных подуровней основного состояния, обусловленные взаимодействием с возбужденным состоянием, одинаковы, поэтому расстояние между подуровнями линейно увеличивается с ростом давления.

Аппроксимируя выражения для частоты люминесцентного излучения в области малых давлений линейной зависимостью, можно определить константы деформационного потенциала b_1 , d_1 , которые оказались равными экспериментально определенным в [1]: $b_1 = -0.195$ эВ, $d_1 = -1.8$ эВ. Отклонение от линейности экспериментального смещения с давлением полосы люминесценции [1] позволяет найти отношения: $\gamma^2/\Delta = 30$ эВ, $\delta^2/\Delta = 1100$ эВ. Соответствующие этим значениям

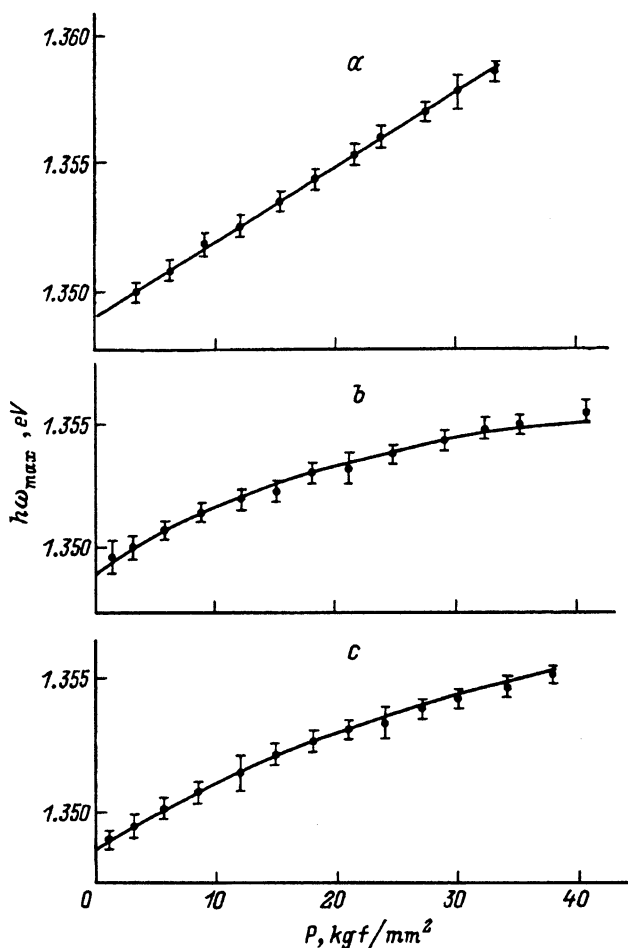


Рис. 1. Расчетная зависимость энергии максимума люминесцентного излучения $h\omega_{\max}$ от давления P . а — $P \parallel [001]$, б — $P \parallel [111]$, в — $P \parallel [110]$. Точки — экспериментальные данные [1].

расчетные зависимости спектрального положения максимума полосы $\hbar\omega_{\max}$ от P в случае деформаций вдоль осей [001], [111] и [110] приведены на рис. 1, а-с.

Рассмотрим вопрос о вычислении зависимости поляризационного отношения ρ от давления в рамках нашей модели. Вероятность $W_x^{E_1}$ перехода электронов со дна зоны проводимости или с уровнями мелкого донора на подуровень E_1 основного уровня с испусканием света, поляризованного в направлении координаты x , пропорциональна сумме квадратов модулей матричных элементов оператора оптического возмущения $V_{\text{opt}} \in \epsilon x$, вычисленных на функциях S -типа дна зоны проводимости и на волновых функциях $\Psi_1^{E_1}$ и $\Psi_2^{E_1}$ примесного центра. Последние являются линейной суперпозицией базисных функций основного и возбужденного состояний, соответствующих уровню E_1 в поле деформации. Коэффициенты разложения определяются на основе теории возмущений из вида ранее записанной матрицы гамильтониана дырки, имеющей два Γ_8 -уровня, с учетом деформации. Для случая $P \parallel [001]$ получаем

$$W_x^{E_1} = Ae^2 \epsilon^2 \left(g - \frac{\gamma \epsilon_1}{\Delta} g' \right)^2. \quad (5)$$

Здесь $g = \langle S(r)|x|X \rangle$, $g' = \langle S(r)|x|X' \rangle$ — интегралы, вычисленные соответственно на невозмущенных деформацией функциях основного и возбужденного состояний.

Аналогично определяется вероятность $W_x^{E_2}$ перехода электронов на подуровень E_2 с испусканием света, поляризованного в направлении координаты x ,

$$W_x^{E_2} = \frac{1}{3} Ae^2 \epsilon^2 \left(g + \frac{\gamma \epsilon_1}{\Delta} g' \right)^2. \quad (6)$$

Соответствующие расчеты величин $W_z^{E_1}$ и $W_z^{E_2}$ ($P \parallel z \parallel [001]$) дают значения

$$W_z^{E_1} = 0, \quad W_z^{E_2} = \frac{4}{3} Ae^2 \epsilon^2 \left(g + \frac{\gamma \epsilon_1}{\Delta} g' \right)^2. \quad (7)$$

В результате для поляризационного отношения излучения $\rho = (I_z - I_x)/(I_z + I_x)$ (I_z, I_x — интенсивности излучения, поляризованного в направлениях z и x соответственно) с учетом Больцмановского распределения дырок по подуровням E_1, E_2 центров получается следующее выражение:

$$\rho = \frac{(1+x)^2 - (1-x)^2 e^{-\Delta E/kT}}{(5/3)(1+x)^2 + (1-x)^2 e^{-\Delta E/kT}}. \quad (8)$$

Подобное выражение можно получить для $P \parallel [111]$. Здесь

$$x = \frac{g'}{g} \frac{\gamma \epsilon_1}{\Delta}, \quad \Delta E = E_1 - E_2 = 2b_1 \epsilon_1 \quad \text{для } P \parallel [001]$$

и

$$x = \frac{g'}{g} \frac{\sqrt{3} \delta \epsilon_{xy}}{\Delta}, \quad \Delta E = E_1 - E_2 = 2\sqrt{3} d_1 \epsilon_{xy} \quad \text{для } P \parallel [111].$$

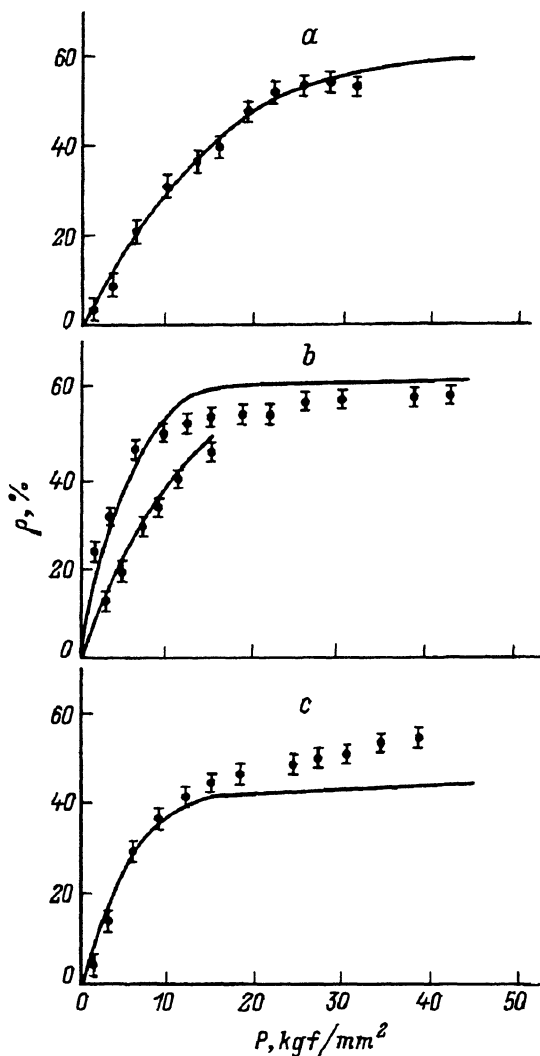


Рис. 2. Расчетная зависимость поляризационного отношения ρ от давления P при $\Delta = 13$ мэВ. $a - P \parallel [001]$, $b - P \parallel [111]$, $c - P \parallel [110]$. I — $g'/g = 1$, $T_{\text{eff}} = 9.2$ К, $T_{\text{exp}} = 5$ К; II — $g'/g = 1$, $T_{\text{eff}} = 25$ К, $T_{\text{exp}} = 15$ К. Здесь T_{exp} — температура в эксперименте.

Определяющим в зависимости ρ от давления является экспоненциальный член, содержащий линейное по деформации расщепление основного уровня. Это, к сожалению, не позволяет достаточно уверенно определить величины $(g'/g)(\gamma'/\Delta)$ и $(g'/g)(\delta/\Delta)$ из сопоставления зависимости $\rho(P)$ с экспериментом, так как при малых давлениях роль этих членов мала, а при больших давлениях ρ стремится к насыщению.

Положив в рамках принятого приближения ($\Delta \gg b_1 \varepsilon_1$) $\Delta = 10b_1 \varepsilon_1$ при $P = 45$ кгс/мм², получим $\Delta = 13$ мэВ. Отсюда $\gamma = -0.624$ эВ, $\delta = -3.78$ эВ, что представляется разумным. Фиксируя Δ (или g'/g), можно подбирать различные значения g'/g (или Δ) и эффективной тем-

пературы $T_{\text{эф}}$, наиболее отвечающие экспериментальным данным [1]. На рис. 2, $a-c$ приведены расчетные зависимости $\rho(P)$, соответствующие значению $\Delta = 13$ мэВ, для деформаций вдоль осей [001], [111] и [110].

Отличие экспериментальных значений ρ в насыщении от расчетных может быть объяснено подмешиванием к основному состоянию состояний с другой симметрией.

Список литературы

- [1] W.Schairer, D. Bimberg, W. Kottler, K. Cho, M. Schmidt. Phys. Rev. B, **13**, 3452 (1976).
- [2] Н.Н. Климакова, Е.Б. Осипов, Н.А. Осипова, Е.В. Цветкова. ФТП, **25**, 558 (1991).
- [3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М., Наука, 1989).

Редактор Л.В. Шаронова

The role of the excited state in piezoelectroscopic properties of an Sn_{As} acceptor in GaAs

I.V. Kostin, E.B. Osipov, N.A. Osipova, N.O. Sorokina

Cherepovetz State Pedagogical Institute, 162600 Cherepovetz, Russia
