

МОДЕЛЬ АКЦЕПТОРА Sn_{As} В GaAs В УСЛОВИЯХ ВНЕШНЕЙ ДЕФОРМАЦИИ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ

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

Череповецкий государственный

педагогический институт им. А.В. Луначарского,

162600 Череповец, Россия

(Получена 27 апреля 1995 г. Принята к печати 14 марта 1996 г.)

Объясняются пьезоспектроскопические и магнитооптические свойства центра Sn_{As} в GaAs на основе модели, предполагающей возникновение у акцептора Sn_{As} двух близко лежащих Γ_8 -уровней в запрещенной зоне. В данной работе модель акцепторного центра Sn_{As} развита на случай связывания акцептором экситона с линией рекомбинационного излучения 1.507 эВ в поле внешней деформации и магнитном поле. Полученные пьезоспектроскопические и магнитооптические зависимости удовлетворительно согласуются с экспериментальными.

Центр Sn_{Ga} как донор в GaAs достаточно подробно изучен, в то время как свойства акцептора Sn_{As} экспериментально исследовались лишь в работе [1].

Особенности рекомбинации связанного на акцепторе Sn_{As} экситона при одноосной деформации и в магнитном поле интерпретировались в [1] в модели псевдодонора. Для объяснения нелинейного сдвига линии люминесценции в поле внешней деформации, обусловленной акцептором Sn_{As} , не были привлечены какие-либо модельные представления. С целью анализа указанных нелинейностей в работе [2] была предложена модель, предполагающая возникновение при легировании GaAs оловом двух близко лежащих Γ_8 -уровней в запрещенной зоне, расстояние между которыми мало по сравнению с энергией ионизации.

В настоящей работе модель акцепторного центра Sn_{As} [2] развита на случай произвольного деформационного расщепления, сравнимого с энергетическим расстоянием между основным и возбужденным Γ_8 -уровнями, а также на случай связывания акцептором экситона с линией рекомбинационного излучения 1.507 эВ.

При связывании на нейтральном акцепторе экситона обменное взаимодействие дырок приводит к расщеплению состояний с полным моментом $F = 0$ и $F = 2$. Энергия двух дырок с учетом обменного взаимодействия в условиях деформации $P||[001]$ и $P||[111]$ имеет следующий вид:

$$E_{\text{ini}} = E_0 - \frac{3}{2}I - \sqrt{\frac{9}{4}I^2 + 4b^2\varepsilon_1^2 + 4d^2(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yz}^2 + \varepsilon_{xz}^2)} + A\text{Sp}\varepsilon, \quad (1)$$

где E_0 — энергия основного состояния дырок с учетом обменного взаимодействия в отсутствие деформации; $|3I|$ — величина обменного расщепления состояний с $F = 0$ и $F = 2$; ε_{ij} — компоненты тензора деформации; $\text{Sp}\varepsilon = \sum \varepsilon_{ii}$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_{zz} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2$; A , $2b$, $2d$ — константы деформационного потенциала системы двух дырок.

В конечном состоянии (после рекомбинации электрона и дырки) на центре связана одна дырка, уровень энергии которой расщеплен внешним давлением на два подуровня. С учетом перепутывания основного и возбужденного состояний [2] энергии расщепленных подуровней основного уровня в условиях деформации $P||[001]$ имеют вид

$$E_{\text{fin}} = -E_A + \frac{\Delta \pm b_1\varepsilon_1 \pm b_2\varepsilon_1}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Delta \mp b_1\varepsilon_1 \pm b_2\varepsilon_1}{2}\right)^2 + \gamma^2\varepsilon_1^2 + a_1\text{Sp}\varepsilon}. \quad (2)$$

Здесь E_A — расстояние между вершиной валентной зоны и основным Γ_8 -уровнем в отсутствие деформации; b_1 , b_2 — константы деформационного потенциала основного и возбужденного состояний; γ — константа, характеризующая взаимодействие подуровней в поле деформации; a_1 — константа изотропной деформации примесного центра;

$$\varepsilon_1 = \frac{P}{c_{11} - c_{12}}, \quad \text{Sp}\varepsilon = \frac{P}{c_{11} + 2c_{12}},$$

c_{11} , c_{12} , c_{44} — упругие модули кристалла GaAs.

Энергия кванта излучения определяется разностью энергий начального двухдырочного и конечного состояний с одной дыркой

$$\hbar\omega = F_{\text{ini}} + E_c - E_{\text{fin}}, \quad (3)$$

где $E_c = -E_g - a_c\text{Sp}\varepsilon$ — энергия электрона дна зоны проводимости (отсчет энергий в глубь валентной зоны).

Здесь E_g — ширина запрещенной зоны, a_c — константа изотропной деформации дна зоны проводимости. С учетом переходов на оба подуровня конечного состояния дырки получают две линии рекомбинационного экситонного излучения.

Результаты расчетов зависимости $\hbar\omega(P)$ для случаев $P||[001]$ и $P||[111]$ приведены на рис. 1, a и b соответственно, где

$$A - a_c - a_1 = -10.5 \text{ эВ}, \quad d = -3.7 \text{ эВ}, \quad d_1 = -1.8 \text{ эВ}, \quad d_2 = -2 \text{ эВ}, \\ \Delta = 6 \text{ мэВ}, \quad 3I = -1.3 \text{ мэВ}, \quad b = -0.58 \text{ эВ}, \\ b_1 = b_2 = -0.195 \text{ эВ}, \quad \gamma = -0.197.$$

Значение энергии возбужденного состояния $\Delta = 6 \text{ мэВ}$ меньше рассчитанных в приближении эффективной массы энергий возбуждений мелких акцепторов ($\approx 20 \text{ мэВ}$), однако попадает в область экспериментально наблюдаемых линий люминесценции, создаваемых целым рядом акцепторов в GaAs [3].

Формулы для движения уровней с давлением и поляризации экситонного рекомбинационного излучения инвариантны относительно замены знака константы обменного взаимодействия, т.е. результаты не

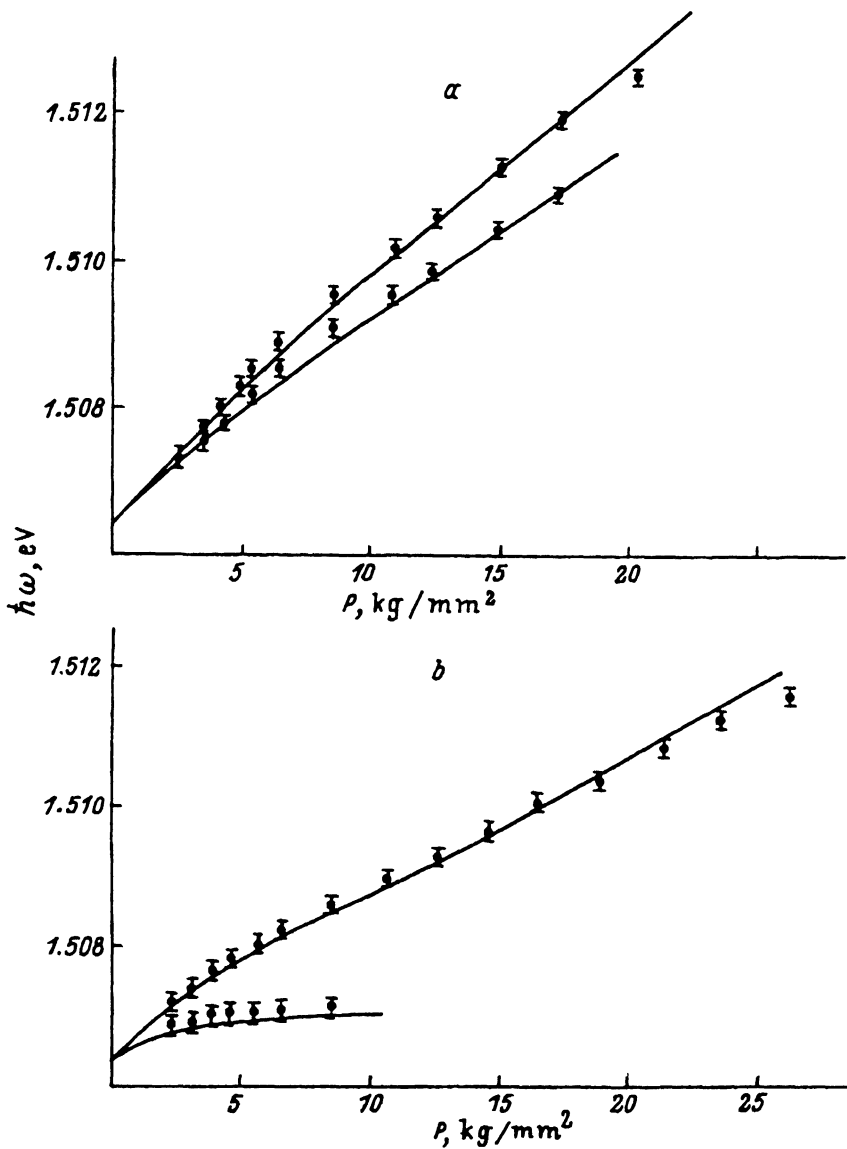


Рис. 1. Зависимость положения максимумов линий рекомбинационного излучения экситона, связанного на Sn_{As} , от давления при $a - P \parallel [001]$, $b - P \parallel [111]$.

зависят от того, какое состояние двух дырок на акцепторе является основным с $F = 2$ или $F = 0$.

Рассмотрим поведение примесного центра Sn_{As} , связывающего экситон, в магнитном поле H . Экспериментальные данные [1] указывают на нелинейный характер диамагнитного сдвига линий люминесценции с изменением H . Это может быть объяснено нелинейной зависимостью энергии системы в начальном или конечном состоянии. В случае большого обменного взаимодействия дырки центра и дырки экситона в начальном состоянии поведение системы можно объяснить на осно-

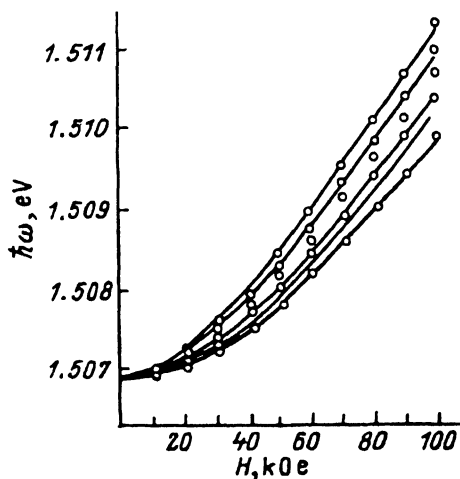


Рис. 2. Движение линий рекомбинационного излучения экситона, связанного на SnAs , в магнитном поле. Сплошные линии — расчетные данные; точки — экспериментальные данные.

ве водородоподобной модели, суть которой состоит в рассмотрении движения электрона в поле центра, связывающего две локализованные дырки. Однако добавки к энергии начального состояния системы в постоянном магнитном поле, вычисленные на водородоподобных функциях электрона на основе теории возмущений [4], дают значительно меньший вклад в энергию диамагнитного сдвига линий по сравнению с экспериментальными данными [1].

В связи с этим нелинейность движения экситонной линии в магнитном поле может быть объяснена взаимодействием основного и возбужденного Γ_8 -уровней центра с одной дыркой в конечном (после рекомбинации) состоянии.

Оператор, описывающий диамагнитное расщепление акцепторного центра с одной дыркой в магнитном поле, можно записать в виде

$$\hat{H}(H) = \mu_B g \left[(\hat{J}\hat{H}) + q(\hat{J}_x^3 H_x + \hat{J}_y^3 H_y + \hat{J}_z^3 H_z) \right], \quad (4)$$

где μ_B — магнетон Бора, g — g -фактор дырки, \hat{J} — оператор вектора полного момента дырки, q — постоянная.

Рассмотрим случай, когда магнитное поле направлено вдоль оси [001]. Постоянную q будем считать одинаковой для обоих уровней.

Зависимость $E(H)$ энергии подуровней основного уровня от напряженности магнитного поля записывается в виде

$$E_m = -E_A + \frac{\Delta}{2} + \frac{1}{2} m \mu_B (g_1 + g_2) (1 + m^2 q) H - \sqrt{\left[\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{2} m \mu_B (g_2 - g_1) (1 + m^2 q) H \right]^2 + [m \mu_B g' (1 + m^2 q) H]^2},$$

где $m = \pm 1/2, \pm 3/2$, g_1 и g_2 — g -факторы основного и возбужденного уровней соответственно, g' — g -фактор, характеризующий взаимодействие между уровнями в магнитном поле.

Зависимость кванта энергии излучения $\hbar\omega(H)$ определяется законом сохранения энергии, и с учетом правил отбора выявляется шесть линий разрешенных переходов. На рис. 2 приведены экспериментальные и рассчитанные для $\Delta = 6$ мэВ, $g_1 = 0.95$, $g' = 21.5$, $q = -0.298$ зависимости $\hbar\omega(H)$.

Использованные в модели константы деформационного потенциала и g -фактор основного состояния согласуются с аналогичными величинами для мелких акцепторов ($d \approx 4$ эВ, $g \approx 1$).

Полученное удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных пьезоспектроскопических и магнитооптических зависимостей в рамках одной модели центра Sn_{As} , учитывающей близость возбужденного уровня к основному, позволяет надеяться на адекватность данной модели физической ситуации.

Список литературы

- [1] W. Schairer, D. Bimberg, W. Kottler, K. Cho, M. Schmidt. Phys. Rev. B, **13**, 34 (1976).
- [2] И.В. Костин, Е.Б. Осипов, Н.А. Осипова, Деп. в ВИНТИ 08.02.94, N 341-B94 (Череповецкий гос. пед. ин-т, Череповец, 1994).
- [3] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. *Оптические свойства полупроводников. Справочник* (Киев, Наук. думка, 1987).
- [4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. (М., Наука, 1989).
- [5] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).

Редактор В.В. Чалдышев

A model of Sn_{As} acceptor in GaAs under conditions of external deformation and magnetic field

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

Cherepovets State Pedagogical Institute, 162600 Cherepovets, Russia