

УДК 621.315

## РОЛЬ ГОФРИРОВКИ ИЗОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ В ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДАХ «ЗОНА—ПРИМЕСЬ»

И. П. Ипатова, Я. Т. Узунова, В. А. Харченко

Рассмотрено влияние гофрировки изоэнергетических поверхностей валентной зоны полупроводниковых кристаллов на частотную зависимость оптических переходов «примесь—зона». Показано, что при увеличении степени гофрировки, частотная зависимость сечений для переходов с участием тяжелых дырок становится более резкой, в то время как сечения процессов для легких дырок становятся более плавными. Аналитически и численно найдены зависимости сечений переходов «валентная зона—донор» от частоты поглощаемых квантов при различных степенях гофрировки.

Исследования оптических переходов «зона—примесь» в полупроводниковых кристаллах не потеряли своей актуальности до настоящего времени, хотя история этих исследований насчитывает уже несколько десятилетий. Если первые работы констатировали факт существования оптических переходов «примесь—зона», то в современных исследованиях эти переходы используются для идентификации состояний свободных носителей, выяснения механизма люминесценции существенно неравновесных («горячих») электронов и дырок, исследования релаксационных процессов при оптической ориентации и т. д. В настоящей работе изучено влияние гофрировки изоэнергетических поверхностей валентной зоны полупроводникового кристалла на формирование оптических переходов «валентная зона—донор».

Рассмотрим оптическое поглощение циркулярно-поляризованного света (при распространении света вдоль оси  $Z$  вектор поляризации равен  $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y)$ ), сопровождаемое забросом электрона из валентной зоны в основное состояние мелкого кулоновского донора. Аналогичные исследования сечений поглощения света, как поляризованного, так и неполяризованного, выполнены в целом ряде работ в «сферическом приближении» [1-3], когда в гамильтониане Латинжера, описывающего состояния валентной зоны, опущены члены, ответственные за эффект гофрировки изоэнергетических поверхностей дырок. В прямозонных полупроводниковых кристаллах валентная зона состоит из подзон легких  $\eta=l$  и тяжелых  $\eta=h$  дырок, а также из подзоны, отщепленной спин-орбитальным взаимодействием. Влияние последней на оптические переходы «валентная зона—донор» мало для большинства прямозонных кристаллов, поскольку величина спин-орбитального расщепления  $\Delta_{SL}$  существенно превышает энергию связи электрона на мелком кулоновском доноре  $E_B$ . Состояния свободного движения легких и тяжелых дырок в валентной зоне описываются блоховскими функциями

$$\Psi_{\eta, \mu} = \exp(ikr) u_{\mu}(\mathbf{k}_{\eta}, \mathbf{r}), \quad \begin{array}{l} \eta=l, \mu = \pm 1/2, \\ \eta=h, \mu = \pm 3/2, \end{array} \quad (1)$$

где  $k_{l,h}$  — квазимпульс легких и тяжелых дырок соответственно.  $\mu = \pm 1/2$  и  $\mu = \pm 3/2$  — спиральности дырочных состояний для  $\eta=l$  и

$\eta = \hbar$  подзона,  $u_{\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  — блоховские амплитуды соответствующих состояний,  $u_{\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  выражаются через линейную комбинацию волновых функций  $\varphi_M$ , описывающих четырехкратно вырожденное состояние «дна» валентной зоны  $k=0$ , имеющего симметрию  $\Gamma_8$ . Для определенности выпишем явный вид базисных волновых функций  $\varphi_M$ , которые, следуя [4], используются для получения явного вида матричных элементов

$$u_{\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_M \chi_{\mu M}(\vartheta) \varphi_M, \quad \vartheta \equiv \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}, \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{M=3/2} &= -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle, \quad \varphi_{M=-3/2} = \frac{X-iY}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle, \\ \varphi_{M=1/2} &= -\frac{X+iY}{\sqrt{6}} |\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} Z |\uparrow\rangle, \quad \varphi_{M=-1/2} = \frac{X-iY}{\sqrt{6}} |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} Z |\downarrow\rangle, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где  $X, Y, Z$  — координатные волновые функции состояний валентной зоны кубического кристалла при  $k=0$ ,  $|\uparrow\rangle$  и  $|\downarrow\rangle$  — спиновые волновые функции с соответствующей ориентацией проекции спина. Конкретный вид проекционных коэффициентов  $\chi_{\mu M}$  выписан в [4], мы же отметим только, что величины  $\chi_{\mu M}$  зависят от направления квазиимпульса дырки  $\vartheta = \mathbf{k}/k$ . Закон дисперсии зонных состояний при этом имеет вид

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{l, h}(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} [\gamma_1 \pm 2\gamma_2 g(\vartheta)], \\ g(\vartheta) &= [1 + 3\delta(\delta + 2)(\vartheta_x^2 \vartheta_y^2 + \vartheta_x^2 \vartheta_z^2 + \vartheta_y^2 \vartheta_z^2)]^{1/2}, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где  $\delta$  — параметр, характеризующий степень гофрировки изоэнергетических поверхностей валентной зоны.  $\delta$  выражается через стандартные параметры гамильтониана Латтинжера  $\gamma_2$  и  $\gamma_3$ ,

$$\delta = (\gamma_3 - \gamma_2)/\gamma_2. \quad (5)$$

Случай  $\delta=0$  соответствует отсутствию гофрировки, при этом  $\chi_{\mu M}(\vartheta)$  являются компонентами матрицы вращений на угол  $\vartheta$  для состояний с полным моментом  $\mathcal{J}=3/2$ . Для значений  $\delta \gg 1$  имеет место сильная гофрировка изоэлектронных поверхностей валентной зоны.

Найдем сечения поглощения поляризованного света при учете гофрировки изоэлектронных поверхностей валентной зоны. Не останавливаясь подробно на деталях вычислений, получим методом работы [5] дифференциальные сечения поглощения света  $d\sigma_{m, \eta}/d\Omega_{\nu}$  с образованием легкой  $\eta = l$  и тяжелой  $\eta = h$  дырок с квазиимпульсом, направленным под углом  $\vartheta = \mathbf{k}/k$  к оси кристалла  $Z$

$$\frac{d\sigma_{m, \eta}}{d\Omega_{\nu}} = \frac{16e^2 P^2}{m_0^2 n \omega_0 c E_B} \frac{\left(\frac{m_{\eta}}{m_c}\right)^{3/2} x^{1/2}}{\left[1 + \frac{m_{\eta}}{m_c} x\right]^4} Q_{m, \eta}(\vartheta), \quad (6)$$

где  $P = \int Z \hat{p} S d^3 r$  — дипольный матричный элемент межзонного перехода;  $m_c$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости;  $m_{\eta}(\vartheta)$  — эффективные массы легких и тяжелых дырок, зависящие от направления  $\vartheta = \mathbf{k}/k$ ;  $n$  — показатель преломления света для квантов с частотой  $\omega_0 \simeq E_g/\hbar$ ;  $m = \pm 1/2$  — проекция спина электрона, связанного на доноре, на направление светового пучка; переменная  $x$  описывает превышение энергии кванта  $\hbar\omega$  над пороговым для поглощения значением в единицах  $E_B$ ,

$$x = \frac{\hbar\omega - (\hbar\omega_0 - E_B)}{E_B} = \frac{\hbar\omega - E_g + E_B}{E_B}, \quad (7)$$

$Q_{m,\eta}(\delta)$  — сомножители, содержащие угловые зависимости дипольных матричных элементов соответствующих состояний  $\eta = l, h$

$$Q_{1/2,\eta} = \frac{12(\delta+1)^2(\partial_x^2\partial_y^2 + \partial_x^2\partial_z^2 + \partial_y^2\partial_z^2) + 3(\partial_x^2 - \partial_y^2)^2}{12(\delta+1)^2(\partial_x^2\partial_y^2 + \partial_x^2\partial_z^2 + \partial_y^2\partial_z^2) + 3(\partial_x^2 - \partial_y^2)^2 + [2g \mp (1 - 3v_z^2)]^2}, \quad (8)$$

$$Q_{-1/2,\eta} = \frac{[2g \mp (1 - 3v_z^2)]^2}{3\{12(\delta+1)^2(\partial_x^2v_y^2 + v_x^2v_z^2 + v_y^2v_z^2) + 3(v_x^2 - v_y^2)^2 + [2g \mp (1 - 3v_z^2)]^2\}}. \quad (9)$$

Матричные элементы (8) соответствуют процессу оптической ориентации спинов электронов, локализованных на донорах, по оси светового пучка, а (9) — против оси.

Полные сечения поглощения света  $\sigma_{m,\eta}$  с образованием электронного состояния донора с проекцией спина  $m = \pm 1/2$  и дырки в  $\eta$  подзоне полу-

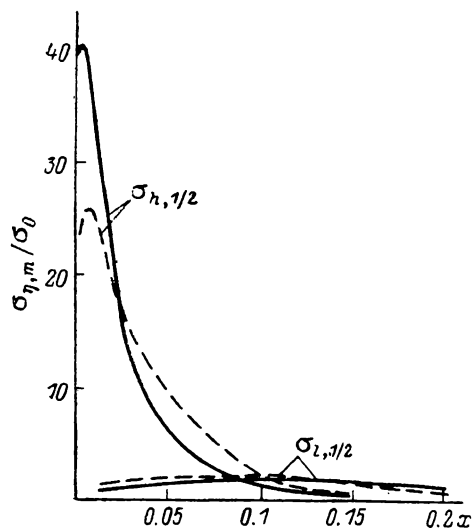


Рис. 1. Зависимость сечений поглощения циркулярно-поляризованного света  $\sigma_{\eta,m}$  в кристаллах InSb от частоты поглощаемого кванта  $x = (\hbar\omega - E_g + E_B)/E_B$ .

Параметр гофрировки  $\delta \approx 0.12$ , значение проекции спина электрона на направление пучка света для всех приведенных сечений  $m=1/2$ . Штриховые кривые — расчет сечений без учета гофрировки ( $\delta \approx 0$ ).

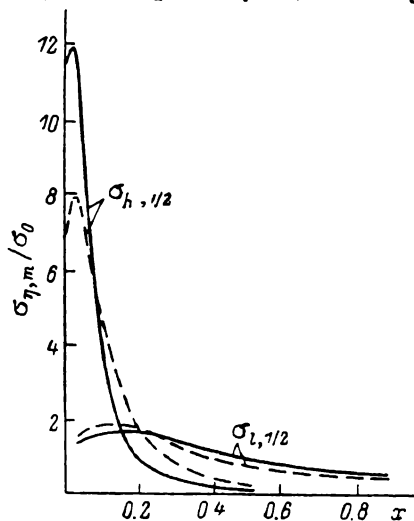


Рис. 2. Частотные зависимости сечений поглощения  $\sigma_{\eta,m}$  для кристаллов GaAs.

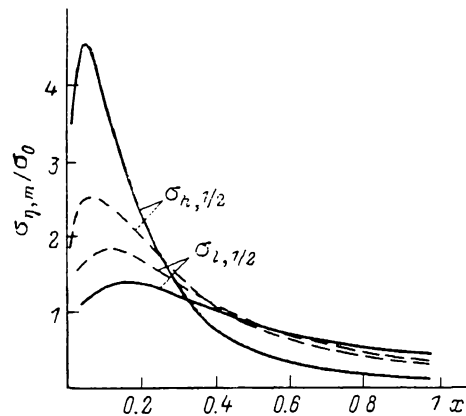
Параметр гофрировки изоэнергетических состояний валентной зоны  $\delta \approx 0.28$ .

чаются интегрированием дифференциальных сечений (6) по всем направлениям квазиимпульса дырок, образовавшихся в результате поглощения света. Для произвольной величины параметра гофрировки  $\delta$  вычисление интегралов проводилось на ЭВМ и результаты вычислений  $\sigma_{m,\eta}(x)$  представлены на рис. 1 для оптических переходов в InSb ( $\delta \approx 0.12$ ) и на рис. 2 для GaAs ( $\delta \approx 0.28$ ). На рис. 3 приведены расчеты сечений для модельного полупроводникового кристалла с большим значением параметра гофрировки состояний валентной зоны  $\delta \approx 2.7$  (отметим, что такая степень гофрировки валентной зоны наблюдается в Si, который, однако, не является прямозонным).

Результаты вычислений в различных случаях обнаруживают одинаковое влияние гофрировки изоэнергетических поверхностей на функциональные зависимости сечений  $\sigma_{m,\eta}(x)$ : 1) при увеличении степени гофрировки  $\delta$  частотная зависимость сечений поглощения с участием зоны тяжелых дырок становится более резкой, т. е. величина максимального значения  $\sigma_{m,h}$  возрастает и максимум сдвигается в область меньших частот (меньших значений  $x$ ); 2) в области высоких частот  $\sigma_{m,h}(x)$  заметно меньше сечений, вычисленных в сферическом приближении  $\delta=0$ ;

3) сечения поглощения с образованием легких дырок  $\sigma_{m,l}(x)$  при увеличении степени гофрировки проявляют тенденцию прямо противоположную сечениям  $\sigma_{m,h}$  — кривые  $\sigma_{m,l}$  с ростом  $\delta$  становятся ниже и шире, приобретая более плавный характер зависимости от  $x$ .

Указанные выше результаты можно пояснить следующим образом: при увеличении степени гофрировки  $\delta$  происходит увеличение среднего значения эффективной массы тяжелой дырки и уменьшение среднего значения эффективной массы легкой дырки. Фактически это означает «расталкивание» дисперсионных кривых  $\epsilon_h(k)$  и  $\epsilon_l(k)$  с ростом степени гофрировки (см. (4)). При таком «расталкивании» легкая дырка становится «легче», а тяжелая «тяжелее». Из теории оптических переходов «примесь—зона» известно [1], что чем тяжелее дырка, тем ярче на кривой поглощения выражен пик в области частот квантов  $x_{\max} \sim m_c \langle m_{\eta}^{-1} \rangle$  (см. формулу (6)). Частотные зависимости сечений с противоположными значениями  $m$



идентичны, и при выбранной нами поляризации света отношение сечений  $\sigma_{1/2,\eta} : \sigma_{-1/2,\eta} = 3$ . Поэтому на рисунках приведены сечения лишь для одной ориентации спина  $m=1/2$ . Для выяснения характера влияния гофрировки на частотные зависимости сечений важно, что интегральное сечение поглощения  $\mathcal{J}_{\eta}$ , то есть

Рис. 3. Частотные зависимости сечений поглощения  $\sigma_{\eta,m}$  для модельного кристалла с большой величиной степени гофрировки  $\delta \approx 2.7$ .

общая площадь под кривыми сечений  $\sigma_{\pm 1/2,\eta}$ , не зависит от величины параметра гофрировки  $\delta$ . Действительно,

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{J}_{\eta} &= \sum_m \int_0^{\infty} \sigma_{m,\eta}(x) dx = \sigma_0 \langle Q_{1/2,\eta} + Q_{-1/2,\eta} \rangle \\ \sigma_0 &= \frac{4\pi^2 e^2 P^2}{m_0^2 n \omega_0 c E_B} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Угловые скобки в формулах (10) означают усреднение по направлениям квазиимпульсов образовавшихся дырок. Во всем интервале изменения значений параметра гофрировки  $0 \leq \delta \leq \infty$  среднее  $\langle Q_{1/2,\eta} + Q_{-1/2,\eta} \rangle = 2/3$ . Это соответствует сохранению площади под кривыми сечений поглощения при изменении степени гофрировки. Следовательно, можно утверждать, что увеличение степени гофрировки  $\delta$  приводит к сужению контура поглощения в переходе «подзона тяжелых дырок—примесь» и уширению контура поглощения для переходов с участием легких дырок при условии сохранения интегральных величин сечений  $\mathcal{J}_l$  и  $\mathcal{J}_h$ .

Полное сечение поглощения «валентная зона—донор» найдем, используя явный вид сечения  $\sigma(x) = \sum_{m,\eta} \sigma_{m,\eta}(x)$ . Из (6) и (8) следует

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}_l + \mathcal{J}_h = \int_0^{\infty} dx \sum_{m,\eta} \sigma_{m,\eta}(x) = \frac{4}{3} \sigma_0 = \frac{16\pi^2}{3} \frac{e^2 P^2}{m_0^2 n \omega_0 c E_B} \quad (11)$$

Как видно из (11), интегральное сечение поглощения  $\mathcal{J} = \mathcal{J}_l + \mathcal{J}_h$  не зависит от степени гофрировки изоэнергетических поверхностей валентной зоны  $\delta$ . Учет гофрировки изменяет характер частотной зависимости  $\sigma(x)$ ,

перераспределя вероятность поглощения из одного частотного диапазона в другой, но таким образом, что интегральное сечение поглощения  $\mathcal{J}$  (площадь под кривой полного поглощения) не меняет своей величины. По существу (11) эквивалентно правилу сумм для сил осцилляторов в атомной физике.

В заключение сформулируем основные закономерности, появляющиеся в оптических переходах «зона—примесь» при учете эффекта гофрировки изоэнергетических поверхностей валентной зоны. 1) Гофрировка изоэнергетических поверхностей существенным образом изменяет угловое распределение дырок, образовавшихся при поглощении света (см. зависимости  $d\sigma_{m,n}/d\Omega$  по формулам (6), (8) и (9)). 2) При увеличении степени гофрировки  $\delta$  частотные зависимости сечений поглощения с участием подзоны тяжелых дырок обнаруживают все более острый максимум в области  $x_{\max} \sim m_c \langle m_n^{-1} \rangle$ , в то время как сечения поглощения с участием подзоны легких дырок приобретают все более плавную зависимость от частоты поглощаемого света. 3) Для полного сечения поглощения света с участием всех состояний валентной зоны, включение эффектов гофрировки приводит к перераспределению вероятности поглощения внутри контура поглощения рассматриваемого оптического перехода. Однако

интегральное сечение поглощения  $\mathcal{J} = \int_0^{\infty} \sigma(x) dx$  сохраняет свою величину,

что является отражением правила сумм для сил осцилляторов.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Dumke W. P. Phys. Rev., 1964, vol. 132, N 5, p. 1998—2007.
- [2] Дымников В. Д., Перель В. И., Полупанов А. Ф. ФТП, 1982, т. 16, № 2, с. 235—246.
- [3] Thuselt F., Phys. St. Sol. (B). 1977, vol. 80, N 2, p. 499—506.
- [4] Келдыш Л. В., Константинов О. В., Перель В. И. ФТП, 1969, т. 3, № 7, с. 1042—1053.
- [5] Ипатова И. П., Узунова Я. Т., Харченко В. А., ФТТ, 1983, т. 25, № 8, с. 2334—2337.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
19 августа 1987 г.