# Влияние полей случайно расположенных в кристалле полупроводника заряженных центров на электронную структуру нейтральных акцепторов и поляризацию люминесценции при переходах ⟨зона проводимости⟩–акцептор

© Е.Б. Осипов, О.В. Воронов, Н.О. Сорокина, В.Б. Борисов

Череповецкий государственный университет,
Череповец, Россия

(Получена 30 декабря 1997 г. Принята к печати 4 ноября 1998 г.)

Случайные поля в кристаллах, создаваемые заряженными примесями и другими дефектами, дают дополнительное расщепление уровней акцепторов, которое, в силу хаотичности направления этих полей, приводит к уменьшению степени поляризации люминесценции в условиях одноосной деформации полупроводника. Вместо обычного описания деполяризации излучения методом эффективной температуры, в работе предлагается модель учета влияния кулоновского поля случайно расположенных заряженных центров на основное состояние акцептора в поле внешней одноосной деформации полупроводника. Сопоставление рассчитанных в данной модели поляризационных характеристик люминесценции при давлении вдоль оси [100] с экспериментальными данными при низких температурах позволяет оценить концентрацию заряженных центров.

Внешняя одноосная деформация вызывает расщепление четырехкратно вырожденных уровней акцепторов в полупроводниках [1]. В условиях неодинакового температурного заселения расщепленных подуровней это приводит к поляризации люминесценции при переходах ⟨зона проводимости⟩–акцептор. Естественно, поляризация такой люминесценции падает с ростом температуры. Случайные поля в кристаллах, создаваемые как заряженными примесями в компенсированных полупроводниках, так и другими дефектами, дают дополнительные расщепления, которые в силу хаотичности направления этих полей также приводят к уменьшению степени поляризации излучения. Наиболее сильное действие случайных полей должно проявиться в условиях, когда величины создаваемых ими расщеплений в среднем сравнимы с расщеплением, создаваемым одноосной деформацией и средней энергией теплового движения $kT$.

Деполяризацию излучения под действием случайных полей обычно описывают путем введения эффективной температуры, на несколько градусов превышающей температуру эксперимента [2]. Законность такой процедуры, однако, является спорной. Дело в том, что заселенность дырок в невырожденном полупроводнике по уровням акцепторов с фиксированным расщеплением в поле одноосной деформации определяется экспоненциальным больцмановским множителем, который проявляется в интегральной поляризации люминесценции. В случае распределения центров по величинам дополнительных случайных расщеплений такой простой экспоненциальной зависимости интегрального поляризационного отношения от внешнего давления нет.

В работе предлагается модель описания деполяризации, в которой учтено влияние на этот эффект кулоновского поля случайно расположенных заряженных центров, оказывающих наиболее сильное воздействие на основное состояние акцептора в поле внешней одноосной деформации. Сопоставление рассчитанных в данной модели поляризационных характеристик люминесценции в поле внешней деформации с экспериментальными данными позволяет оценить концентрацию заряженных центров.

Действие на акцепторный центр случайного поля (т. е. кулоновское взаимодействие заряженного примесного центра и дырки, связанной на нейтральном акцепторе) описывается оператором

$$\widehat{H}_r = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0|\mathbf{R}-\mathbf{r}'|}, \tag{1}$$

где $\mathbf{R}(R,\theta,\varphi)$ и $\mathbf{r}'(r',\theta',\varphi')$ — радиус-вектора заряженного акцептора и дырки нейтрального акцептора соответственно. Используя разложение $1/|\mathbf{R}-\mathbf{r}'|$ по сферическим функциям [3], запишем матрицу оператора энергии дырки с учетом действия на акцептор заряженного центра с координатами $R,\theta,\phi$ в поле внешнего давления $p$, приложенного вдоль оси $z \parallel [001]$ в виде

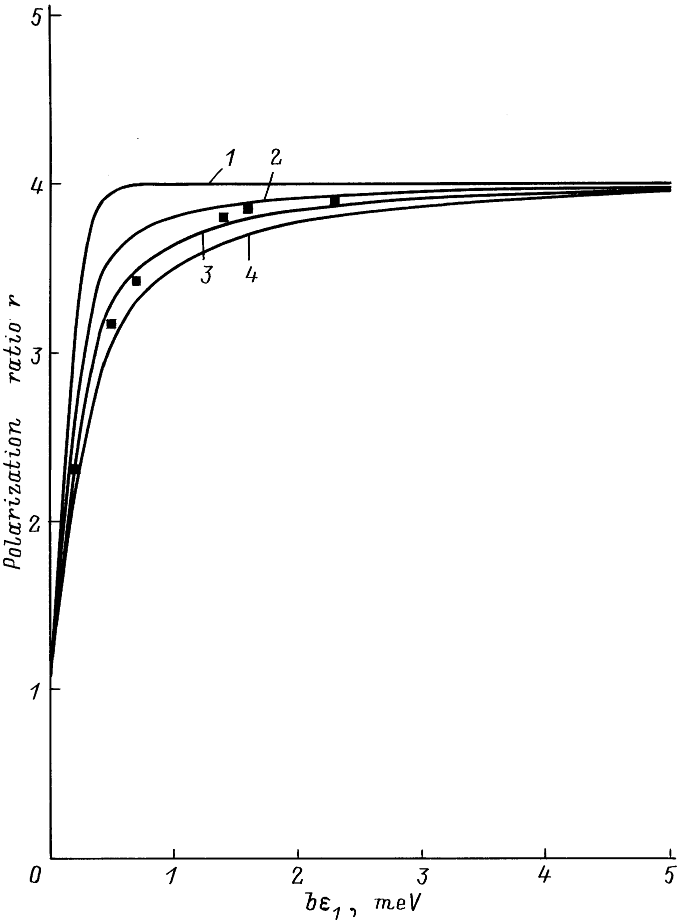
$$\begin{pmatrix} A & Be^{-i\varphi} & Ce^{-2i\varphi} & 0 \\ Be^{i\varphi} & -A & 0 & Ce^{-2i\varphi} \\ Ce^{2i\varphi} & 0 & -A & -Be^{-i\varphi} \\ 0 & Ce^{2i\varphi} & -Be^{i\varphi} & A \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Матрица вычислена в приближении $R \gg r_0$, в нее не включена энергия электростатического взаимодействия, не вызывающая расщепления уровня $\Gamma_8$, и введены следующие обозначения:

$$A = b\varepsilon_1 + \frac{3}{10}D\left(3\cos^2\theta - 1\right)\frac{r_0^2}{R^3},\quad B = D\frac{3\sqrt{3}}{5}(\sin\theta\cos\theta)\frac{r_0^2}{R^3},$$

$$C = D\frac{3\sqrt{3}}{10}(\sin^2\theta)\frac{r_0^2}{R^3},\quad D = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0},\quad \varepsilon_1 = \frac{p}{c_{11}-c_{12}}, \tag{3}$$

где $b$ — константа деформационного потенциала, $c_{11}, c_{12}$ — упругие модули кристалла, $r_0$ — радиус связанного состояния дырки нейтрального акцептора, $\varepsilon$ —




Зависимости интегрального поляризационного отношения $r$ от величины расщепления уровня $b\varepsilon_1$ при давлении вдоль оси [100]: *1–4* — расчет; точки — экспериментальные значения из работы [2]. Концентрация заряженных центров $n$, $10^{16}$ см$^{-3}$: *1* — 0, *2* — 1, *3* — 2, *4* — 3.

диэлектрическая проницаемость материала (для GaAs в численных расчетах принимаем $\varepsilon = 3.4$).

Для собственных значений гамильтониана получаем выражение

$$E_{1,2} = \pm\sqrt{(b\varepsilon_1)^2 + Db\varepsilon_1\frac{3}{5}(3\cos^2\theta - 1)\frac{r_0^2}{R^3} + D^2\frac{9}{25}\,\frac{r_0^4}{R^6}}. \tag{4}$$

В результате действия деформации и случайного поля акцепторный уровень расщепился на два подуровня, волновые функции которых представлены в виде разложения по базисным функциям:

$$\Psi'_{E_1,E_2} = \frac{1}{N_{1,2}}\Big(-Be^{-i\varphi}\Psi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} + (A-E_{1,2})\Psi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} - Ce^{2i\varphi}\Psi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}\Big),$$

$$\Psi''_{E_1,E_2} = \frac{1}{N_{1,2}}\Big(-Ce^{-2i\varphi}\Psi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} + (A-E_{1,2})\Psi_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} + Be^{i\varphi}\Psi_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}\Big),$$

$$N_{1,2} = \sqrt{B^2 + C^2 + (A - E_{1,2})^2}. \tag{5}$$

Функцию распределения случайных полей по величине и направлению, $dW$, выбираем следующим образом. Пусть $N$ заряженных центров в кристалле распределены квазинепрерывно с плотностью

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi R_0^3}.$$

Здесь $V = \frac{4}{3}\pi R_0^3$ — объем кристалла (шар с центром в начале системы координат, помещаемом в точку расположения нейтрального центра). Считаем, что наиболее сильное расщепление нейтрального акцептора вызывает наиболее близко расположенный к нему акцепторный центр. При этом в силу редкости расположения акцепторов действием других заряженных центров можно пренебречь.

Рассмотрим элемент сферического объема (шарового слоя) $[R, R + dR]$. Вероятность того, что в данный элемент попадет какой-либо из $N$ заряженных центров при условии, что ни один из $N$ центров не попадет в объем $0 \leqslant r \leqslant R$, определяется выражением

$$dW = \left(1 - \int_0^R \frac{\rho}{N}\,4\pi r^2 dr\right)^N \frac{\rho}{N}\,4\pi R^2 dRN.$$

Считая, что внутри шарового слоя заряженные центры с равной вероятностью заполняют любые одинаковые элементы объема $R^2 dR \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$, получим

$$dW = \left[1 - \left(\frac{R}{R_0}\right)^3\right]^N \frac{N}{4\pi R_0^3} 3R^2 dR\, \sin\theta\, d\theta\, d\varphi. \qquad (6)$$

Полагая число $N$ достаточно большим, нетрудно получить, с учетом того что

$$\frac{N}{R_0^3} = \frac{4}{3}\pi n,$$

где $n$ — концентрация заряженных центров, следующее соотношение:

$$dW = e^{-\frac{4}{3}\pi n R^3} 2\pi n R^2 \sin\theta d\theta dR. \qquad (7)$$

Интегральное поляризационное отношение люминесценции определяется следующим образом:

$$r = \frac{I_\parallel}{I_\perp}. \qquad (8)$$

Здесь $I_\parallel, I_\perp$ — интенсивности излучения с вектором электрической напряженности, параллельным и перпендикулярным оси давления соответственно.

Интенсивность излучения прямо пропорциональна квадратам модулей матричных элементов переходов электронов со дна зоны проводимости на подуровни $E_1$ и $E_2$ расщепленного акцепторного уровня, а также заселенности этих подуровней. Полагая, что заселенность дырками расщепленных уровней акцепторов подчиняется распределению Больцмана, получаем следующие выражения:

$$dI_\perp = \Omega\left(\frac{1}{N_1^2}\frac{B^2 + \frac{(A-E_1)^2}{3} + C^2}{1 + e^{-\frac{\delta}{kT}}} + \frac{1}{N_2^2}\frac{B^2 + \frac{(A-E_2)^2}{3} + C^2}{1 + e^{-\frac{\delta}{kT}}} e^{-\frac{\delta}{kT}}\right) dW, \qquad (9)$$

$$dI_\parallel = \Omega\left(\frac{1}{N_1^2}\frac{\frac{4}{3}(A-E_1)^2}{1 + e^{-\frac{\delta}{kT}}} + \frac{1}{N_2^2}\frac{\frac{4}{3}(A-E_2)^2}{1 + e^{-\frac{\delta}{kT}}} e^{-\frac{\delta}{kT}}\right) dW. \qquad (10)$$

Здесь $\delta = E_1 - E_2$, $k$ — постоянная Больцмана, $\Omega$ — постоянный множитель, содержащий квадрат модуля межзонного матричного элемента. Выполнив интегрирование в (9) и (10), найдем интегральные интенсивности поляризационных компонент, которые определяют поляризационное отношение (8).

Результат произведенного расчета отношения $r$ (8) при $T = 2\,\mathrm{K}$ и различных значениях концентрации заряженных примеси приведен на рисунке.

Как видно из рисунка, при значениях концентрации $n = 2 \cdot 10^{16}\,\text{см}^{-3}$ полученная зависимость хорошо согласуется с экспериментальной из работы [2]. Некоторое отклонение экспериментальных точек от рассчитанной кривой может быть объяснено проявлением электронно-колебательного взаимодействия, приводящего к ян-теллеровским искажениям нейтрального акцепторного комплекса.

## Список литературы


[1] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).

[2] Н.С. Аверкиев, З.А. Адамия, Д.И. Аладашвили, Т.К. Амиров, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, В.Е. Седов. ФТП, **21**, 421 (1987).

[3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1989).


*Редактор Т.А. Полянская*