УДК 621.315.592

ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДА ГЛУБОКОГО ЦЕНТРА НА ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ВАЛЕНТНУЮ ЗОНУ II. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

А. А. Пахомов, А. Ф. Полупанов, В. И. Галиев, Э. З. Имамов

Исследовано влияние зарядового состояния глубокого примесного центра и электрон-фононного взаимодействия на спектральную и температурную зависимости сечения фотоионизации дефекта. Показано, что учет совместного влияния этих двух факторов позволяет объяснить наблюдаемый длинноволновый край примесного поглощения без привлечения эмпирических формул типа правила Урбаха.

В работе [1] было показано, что влияние зарядового состояния дефекта на спектральную зависимость его сечения фотоионизации при переходах в сложную валентную зону кубических полупроводников может быть учтено с помощью умножения парциальных сечений фотопереходов в подзоны тяжелых и легких дырок $\sigma^0_{ih}(\varepsilon)$, $\sigma^0_{il}(\varepsilon)$, вычисленных без учета заряда центра, на соответствующие обобщенные факторы Зоммерфельда $S^h_i(\varepsilon)$ и $S^l_i(\varepsilon)$

$$\sigma^c_i(\varepsilon)=S^l_i(\varepsilon)\,\sigma^0_{il}(\varepsilon)+S^h_i(\varepsilon)\,\sigma^0_{ih}(\varepsilon), \tag{1}$$

где $\varepsilon=\hbar\omega-\varepsilon_V$ — надпороговая энергия фотовозбужденного носителя; ε_V — энергетическое расстояние от примесного уровня до потолка валентной зоны; факторы $S^{h,\,l}_i$ описывают изменение относительных долей тяжелых и легких дырок, рождающихся при фотоионизации, за счет кулоновского поля центра; индекс «i» характеризует симметрию центра.

Важно отметить, что факторы Зоммерфельда зависят от симметрии волновой функции локализованного состояния носителя, кинетической энергии вылетающего носителя и параметров зонной структуры, но не зависят от химической природы дефекта и в этом смысле универсальны. Эти факторы Зоммерфельда, определяющиеся видом кулоновских волновых функций сплошного спектра валентной зоны вблизи дефекта, и были вычислены в [1] для примесных центров различной симметрии и различного зарядового состояния в Ge и GaAs.

В работе [1] отмечалось, что на форму края примесного поглощения глубоких центров оказывает значительное влияние не только зарядовое состояние центра, но и электрон-фононное взаимодействие и для детального сравнения с экспериментом и объяснения экспериментальных данных необходим одновременный учет обоих этих факторов. Именно этому и посвящена настоящая работа.

В простейшем одномодовом приближении влияние электрон-фононного взаимодействия на край примесного поглощения можно учесть, воспользовавшись формулой типа Ридли [2] (по поводу отличия выражения (2) от формулы Ридли см. [3])

$$\sigma_{ph}(\hbar\Omega)=\sum_{p=-\infty}^{+\infty}W_p(S,\ \hbar\omega/kT)\,\sigma_i(n\Omega-p\hbar\omega). \tag{2}$$

Здесь $\hbar\Omega$ — энергия фотона; $\hbar\omega$ — энергия фонона; $\sigma_{ph}(\hbar\Omega)$, $\sigma_i(\hbar\Omega)$ — спектральные зависимости сечений фотоионизации при наличии и в отсутствие электрон-фононного взаимодействия ($S=0$) соответственно (предполагается, что $\sigma_i(\hbar\Omega)=0$ при $\hbar\omega < \varepsilon_{TV}$; ε_{TV} — термическая энергия ионизации уровня). Вероятность испускания ($p > 0$) или поглощения ($p < 0$) $|p|$ фононов в рамках одномодовой модели Хуанга—Рис [4] дается соотношением

$$W_p\left(S,\ \frac{\hbar\omega}{kT}\right)=\exp\left\{-2S\left(n_\omega+\frac{1}{2}\right)+p\frac{\hbar\omega}{kT}\right\}I_p\left(2S\sqrt{n_\omega(n_\omega+1)}\right), \qquad (3)$$

S — фактор Хуанга—Рис, характеризующий силу электрон-фононного взаимодействия; $n_\omega(\hbar\omega/kT)$ — функция Бозе—Эйнштейна

$$n_\omega=[\exp(\hbar\omega/kT)-1]^{-1}, \qquad (4)$$

$I_p(x)$ — модифицированная функция Бесселя [5].

В работе Годика, Кузнецова и Синиса [6] исследовалась спектральная зависимость примесной фотопроводимости германия, легированного ртутью. На рис. 1, 2 представлены измеренные в [6] спектральные зависимости фотопроводимости, связанной с выбросом дырки с отрицательно заряженного центра Hg^- ($\varepsilon_{TV}=0.23$ эВ), при различных температурах.

Поскольку состояние Hg^- является акцепторным, а соответствующий уровень приближен к потолку валентной зоны, разумно предположить, что уровню Hg^- соответствует симметрия Γ_{8t}.

Примесный центр Hg^-, выбросив дырку, превращается в двукратно заряженный притягивающий дырку центр Hg^{2-}. Тогда сечение фотоионизации центра можно представить в виде

$$\sigma_8^c(\hbar\Omega)=S_8^{h-}\left[\frac{\hbar\Omega-\varepsilon_T}{\varepsilon_{\delta h}}\right]\sigma_{8h}^0(\hbar\Omega)+S_8^{l-}\left[\frac{\hbar\Omega-\varepsilon_T}{\varepsilon_{\delta h}}\right]\sigma_{8l}^0(\hbar\Omega). \qquad (5)$$

Здесь $\varepsilon_{\delta h}$ — «тяжелодырочный» ридберг; $\varepsilon_{\delta h}=m_hZ^2e^4/(2\varkappa_0^2\hbar^2)$; $\varkappa_0$ — статическая диэлектрическая проницаемость; Z — заряд дефекта после фотоионизации; $\sigma_{8\eta}^0$ — парциальное сечение, соответствующее нейтральному фотовозбужденному центру с той же энергией ионизации, что и Hg^-

$$\sigma_{8\eta}^0=\sigma_8^0(\hbar\Omega)F_\eta(\hbar\Omega),$$

где

$$\sigma_8^0(\hbar\Omega)=\frac{16\pi}{3}b_V^\Gamma(e^2\hbar/n_0m_hc)\sqrt{\varepsilon_T}(\hbar\Omega-\varepsilon_T)^{3/2}(\hbar\Omega)^{-3},$$

$$F_h=1+(3/8)(m_h/m_l-1)^2(\hbar\Omega)^2(\varepsilon_T+(\hbar\Omega-\varepsilon_T)m_l/m_h)^{-2},$$
$$F_l=(m_l/m_h)^{1/2}\{1+(3/8)(1-m_l/m_h)^2(\hbar\Omega)^2(\varepsilon_T+(\hbar\Omega-\varepsilon_T)m_l/m_h)^{-2}\}, \qquad (6)$$

$\varepsilon_T\equiv\varepsilon_{TV}$; m_h, m_l — эффективные массы тяжелых и легких дырок; n_0 — показатель преломления; множитель

$$b_V^\Gamma=\frac{(B_\Gamma^+)^2}{16\pi}\left(\frac{2m_h}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon_V^{-1/2},$$

где константа B_Γ^+ характеризует вклад зонных состояний в окрестности точки Г зоны Бриллюэна в волновую функцию локализованного носителя [7] и может быть оценена в рамках приближения сильной связи. Вывод формул (6) приведен в Приложении. Поскольку при малых надпороговых энергиях кванта $\varepsilon\equiv\hbar\Omega-\varepsilon_T$ имеют место зависимости вида $S_8^{h-}\sim\varepsilon^{-1/2}$, $\sigma_8^0(\varepsilon)\sim\varepsilon^{3/2}$, сечение фотоионизации притягивающего центра имеет в отсутствие электрон-фононного взаимодействия резкую красную границу (рис. 1). Общая форма полосы примесного поглощения аналогична полосе поглощения при фотоионизации мелкого акцептора [8]. На рис. 1, 2 представлены зависимости $\sigma_{ph}^c(\hbar\Omega)$, рассчитанные по формулам (2)—(6)

с одновременным учетом притягивающего кулоновского потенциала дефекта [1] и электрон-фононного взаимодействия для фактора Хуанга—Рис $S=2$ и энергии кванта локальных колебаний $\hbar\omega=14$, 18 мэВ при $T=98$, 186 и 290 К. Для сравнения на рис. 1 приведена зависимость σ^0_{ph} ($\hbar\Omega$), рассчитанная без учета влияния заряда центра. Из этого рисунка видно, что удовлетворительного согласия с экспериментом как по частотной, так и по температурной зависимости можно добиться лишь при одновременном учете и заряда глубокого центра, и электрон-фононного взаимодействия. Отметим, что отклонение рассчитанной кривой от эксперимен-

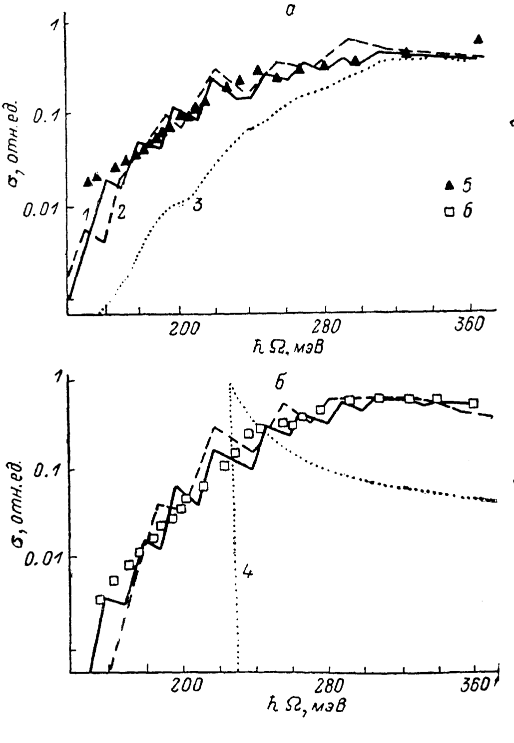

Рис. 1. Сравнение расчета (*1—4*) с экспериментом [6] (*5, 6*) по фотоионизации уровня Hg^- в Ge. $T=290$ (*а*) и 186 К (*б*). $\varepsilon_{TV}=230$ мэВ.

1 — $S=2$, $\hbar\omega=18$ мэВ; *2* — $S=2$, $\hbar\omega=14$ мэВ; *3* — сечение, рассчитанное без учета заряда центра, но с учетом электрон-фононного взаимодействия; *4* — сечение, рассчитанное с учетом заряда центра, но без учета электрон-фононного взаимодействия.

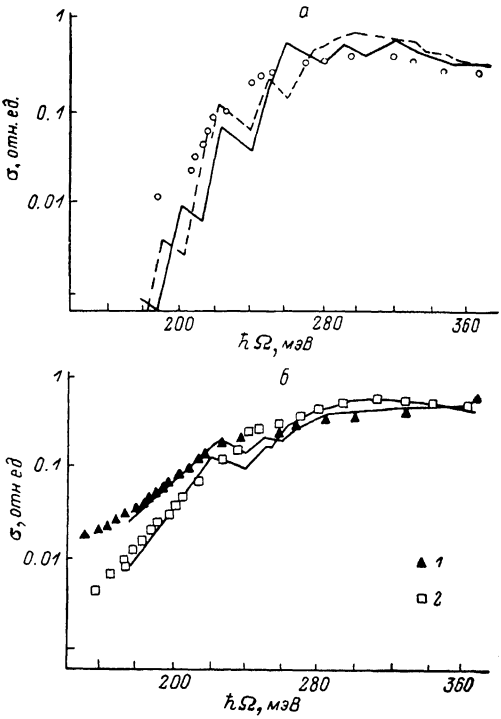

Рис. 2. Сравнение расчета с экспериментом [6] (*а*) и результаты усреднения в интервале энергий фононов $\hbar\omega=14\div20$ мэВ (*б*).

а: $T=290$ К, $S=2$, $\hbar\omega=18$ (сплошная линия) и 14 мэВ (штриховая); *б*: сплошные линии — теория, точки — эксперимент. *1* — $T=290$, *2* — 186 К.

тальной в длинноволновой области спектра (рис. 2, *а*) вероятнее всего связано с вкладом в сечение от фотоионизации недокомпенсированных центров Hg^0 [6].

Обсудим теперь «пилообразный» характер рассчитанной спектральной зависимости σ^c_{ph} ($\hbar\Omega$). Такой характер спектральной зависимости связан со спецификой одномодовой модели Хуанга—Рис, использованной для описания локальных колебаний дефекта, в которой частоты колебаний в состояниях 1 и 2, отвечающих заполненному и «пустому» состояниям центра, одинаковы. Рассмотрим в качестве примера «бесфононные» оптические переходы, т. е. переходы, при которых колебательные квантовые числа дефекта в состояниях 1 и 2 не изменяются [9]. В случае модели Хуанга—Рис ($\omega_1=\omega_2$) всем таким переходам вне зависимости от значения начального колебательного квантового числа соответствует одно и то же значение энергии поглощаемого фотона (при фиксированном значении ε кинетической энергии вылетающего носителя). Если же частоты колебаний в состояниях 1 и 2 различны ($\omega_1 \neq \omega_2$), что, вообще говоря, естественно для состояния Γ_{8i}, то бесфононная линия распадается на множество компонент, сдвинутых относительно друг друга на энергию $\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2$. Качественно такая же картина имеет место и для одно-, двух- и т. д. фононных переходов. Даже при незначительной (~ 10 %) разности частот колебаний этот эффект способен привести к значительному сглаживанию зубцов «пилы».

Другой эффект, приводящий к сглаживанию «пилы», состоит в том, что использованное при сопоставлении с экспериментом значение энергии кванта локальных колебаний $\hbar\omega = 15 \div 20$ мэВ соответствует локальному колебательному уровню, лежащему на фоне сплошного спектра колебаний кристалла (акустические ветви). В результате взаимодействия локального и решеточного колебаний колебательный уровень приобретает конечную ширину Г, время $\tau_E = \hbar/\Gamma$ характеризует скорость развала локальных колебаний на решеточные.

В довольно грубом приближении эти эффекты можно учесть, усреднив кривые на рис. 1, 2, *а* при нескольких близких значениях энергии кванта локальных колебаний. Результат такого усреднения приведен на рис. 2, *б*. Видно, что это усреднение позволяет значительно улучшить согласие теории с экспериментом. Отметим, что на усредненных кривых сохраняется особенность, соответствующая бесфононному переходу, что качественно согласуется с экспериментальными данными. Представляют интерес более подробные измерения спектральных зависимостей сечения фотоионизации в спектральной области, соответствующей бесфононному переходу, которые позволили бы дать дополнительную информацию об адиабатических колебательных потенциалах дефекта [9].

Для описания длинноволнового хвоста примесного поглощения в литературе (в частности, и в работе [6]) широко используется эмпирическое правило Урбаха [10]

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left\{\frac{-(\varepsilon_T - \hbar\Omega)\,\alpha}{kT}\right\},$$

где α — некоторая константа. С тех пор, когда было предложено это правило, предпринят целый ряд попыток его теоретического обоснования (см., например, [11, 12]). Проведенное в данной работе рассмотрение показывает, что спектральную зависимость сечения фотоионизации глубоких центров в достаточно широком спектральном диапазоне, включая длинноволновый край, можно объяснить без привлечения этого правила, аккуратно учтя совместное влияние зарядового состояния дефекта и электрон-фононного взаимодействия.

Отметим в заключение, что появившиеся в последнее время подходы к вычислению сечений фотоионизации дефектов в полупроводниках, основанные на кластерных методах расчета [13], не пригодны для описания интересной с экспериментальной точки зрения спектральной области вблизи края примесного поглощения. Это связано, в частности, с дальнодействующим характером кулоновского потенциала заряженного дефекта, учет которого в рамках кластерных методов связан с очень большими вычислительными трудностями. Кроме того, при малых энергиях дебройлевская длина волны фотовозбужденного носителя может превышать размер кластера. Наш же гораздо более простой подход, использующий лишь небольшой набор параметров дефекта, позволяет хорошо описывать именно эту спектральную область.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В данном Приложении мы ограничимся случаем малых надпороговых энергий фотона ($\hbar\Omega - \varepsilon_T \ll \Delta$, где Δ — величина спин-орбитального расщепления валентных зон), когда можно пренебречь вкладом спин-орбитально отщепленной зоны как в волновую функцию локализованного состояния, так и в волновые функции валентной зоны. Выражение для сечения фотоионизации уровня Γ_{8t} с вылетом дырки в подзону η ($\eta=l$, h) можно представить в виде

$$\sigma^0_{8\eta}(\hbar\Omega)=\frac{(2\pi e)^2}{g n_0 \Omega c}\sum_{m,\,\nu,\,\mathbf{k}}|\langle\Gamma_{8t},\ m|(\nabla_{\mathbf{p}}\mathscr{H},\ \mathbf{e})|\eta\nu\mathbf{k}\rangle|^2\,\delta(\varepsilon_T+\varepsilon_{\eta\nu}(\mathbf{k})-\hbar\Omega),\qquad(\text{П. }1)$$

где мы выразили оператор дипольного момента через оператор скорости $\mathbf{v}=\partial\mathscr{H}/\partial\mathbf{p}$; $\mathscr{H}$ — гамильтониан Латтинджера; $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ — импульс дырки (здесь мы используем импульсное представление); индекс $m=\pm 3/2$, $\pm 1/2$ нумерует волновые функции четырехкратно вырожденного состояния Γ_{8t}, преобразующиеся как компоненты спинора ($J=3/2$); индекс ν характеризует спиральность, соответствующую данному значению η; $g=4$ — кратность вырождения уровня Γ_{8t}; n_0 — показатель преломления; $\mathbf{e}$ — единичный вектор поляризации излучения. Используя явные выражения для волновой функции состояния Γ_{8t} [7], приходим к соотношению

$$\sum_m|\langle\Gamma_{8t},\ m|(\nabla_{\mathbf{p}}\mathscr{H},\ \mathbf{e})\eta\nu\mathbf{k}\rangle|^2=\frac{(B^+_\Gamma)^2}{V}\sum_{\nu'\eta'}|\langle\eta'\nu'\mathbf{k}|(\partial\mathscr{H}/\partial\mathbf{p},\ \mathbf{e})|\eta\nu\mathbf{k}\rangle|^2\times$$
$$\times(\varepsilon_T+\varepsilon_{\eta'\nu'}(\mathbf{k}))^{-2},\qquad(\text{П. }2)$$

где суммирование проводится по всем подзонам валентной зоны, V — нормировочный объем. Вычисление межзонного матричного элемента $\langle\eta'\nu'\mathbf{k}|(\nabla_{\mathbf{p}}\mathscr{H},\ \mathbf{e})|\eta\nu\mathbf{k}\rangle$ удобно проводить в системе координат, в которой ось квантования z направлена вдоль вектора поляризации излучения $\mathbf{e}$. Тогда, используя сферический гамильтониан Латтинджера [1], имеем

$$\left\langle\eta'\nu'\mathbf{k}\left|\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\mathbf{p}_\pm}\right|\eta\nu\mathbf{k}\right\rangle=\frac{\hbar k}{m_0}\left\{\left(\gamma_1+\frac{5}{2}\gamma\right)Y_{10}(\mathbf{k}/k)\,\delta_{\nu\nu'}-\sqrt{15}\,(-1)^{3/2-\nu'}\gamma(\nu+\nu')\times\right.$$
$$\left.\times\sum_{\alpha=\pm1}\begin{bmatrix}3/2 & 1 & 3/2\\ -\nu' & \alpha & \nu\end{bmatrix}Y_{1\alpha}(\mathbf{k}/k)\right\},\qquad(\text{П. }3)$$

где $\gamma=(3\gamma_3+2\gamma_2)/5$, γ_1, γ_2, γ_3 — параметры Латтинджера валентной зоны; таблица в круглых скобках — $3j$-символ Вигнера. Подставляя (П. 3) в (П.2) и (П.1), приходим к формулам (6).

Список литература

[1] Галиев В. И., Пахомов А. А., Полупанов А. Ф. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 11. С. 182—192.
[2] Ridley B. K. // J. Phys. C. 1980. V. 13. P. 2015—2026.
[3] Пахомов А. А. // Автореф. канд. дис. Л., ФТИ, 1989.
[4] Huang K., Phys. A. // Proc. Roy. Soc. A. 1950. V. 204. P. 406—423.
[5] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1978. 832 с.
[6] Годик Э. Э., Кузнецов А. И., Синис В. П. // ФТП. 1981. Т. 15. № 9. С. 1787—1794.
[7] Имамов Э. З., Пахомов А. А., Яссиевич И. Н. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. № 4 (10). С. 1410—1418.
[8] Коган Ш. М., Полупанов А. Ф. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 1. С. 394—412.
[9] Ребане К. К. Элементарная теория колебательной структуры спектров примесных центров кристаллов. М.: Наука, 1968. 232 с.
[10] Urbach F. // Phys. Rev. 1953. V. 92. P. 1324.
[11] Гельмонт Б. Л., Перель В. И., Яссиевич И. Н. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 3. С. 727—773.
[12] Иоселевич А. С. // ЖЭТФ. 1981. Т. 81. № 4(10). С. 1508—1520.
[13] Lanno M. // 19th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors Warsaw, Poland (August, 15—19), 1988. V. 2. P. 951—958.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград
Институт радиотехники и электроники
АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
12 июля 1990 г.