

МЕЖЗОННЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В ЛЕГИРОВАННЫХ МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Федоров А. В., Перлин Е. Ю.

Рассмотрены одно-, двух- и трехфотонные межзонные оптические переходы в легированных непрямозонных полупроводниках, обусловленные резонансным рассеянием на короткодействующей части примесного потенциала. Исследуются ситуации, когда примесный потенциал создает дискретное состояние в запрещенной зоне либо квазидискретное состояние в разрешенной зоне. Получены дисперсии вероятностей одно-, двух- и трехфотонных переходов вблизи порога фундаментального поглощения. Показано, что эти процессы значительно эффективнее процессов с рассеянием на дальнедействующей кулоновской части примесного потенциала.

1. Известно, что излучательная рекомбинация и оптическая генерация электрон-дырочных пар в легированных непрямозонных полупроводниках вблизи фундаментального порога могут определяться не только переходами с участием фононов [1], но и рассеянием на примесном потенциале [2-4]. В то же время механизм, связанный с электрон-электронным рассеянием, оказывается неэффективным, так как лишь экспоненциально малая часть свободных носителей обладает достаточно высокой энергией для передачи виртуальной электрон-дырочной паре необходимого квазиимпульса. Большая величина последнего делает неэффективным и вклад рассеяния на кулоновском потенциале примесей, так что примесный механизм переходов связан в основном с короткодействующей частью потенциала.

В настоящей работе рассмотрены одно- и многофотонные межзонные переходы, сопровождающиеся резонансным примесным рассеянием. Используется известная модель потенциала нулевого радиуса [5-7], позволяющая, не описывая внутреннюю структуру примесного центра, определить дисперсию вероятностей переходов. На основе полученных результатов можно по-новому интерпретировать ряд известных экспериментальных данных.

2. Стандартный одноэлектронный гамильтониан легированного полупроводника в поле световой волны имеет следующий вид:

$$H = H_0 + W + V, \quad (1)$$

где W — примесный потенциал, H_0 — гамильтониан электрона в идеальном кристалле,

$$H_0 \varphi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_l(\mathbf{k}) \varphi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

$\varphi_{l\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $E_l(\mathbf{k})$ — блоховские волновые функции и энергии, V — оператор взаимодействия электрона со светом частоты ω . В дипольном приближении можно ограничиться линейной частью взаимодействия электрона с полем световой волны (квадратичная часть не дает вклада в вероятность перехода):

$$V = -\frac{e_0}{m_0 c} \mathbf{A}(t) \mathbf{p}, \quad (3)$$

где e_0 , m_0 — заряд и масса свободного электрона, \mathbf{p} — оператор импульса электрона, $\mathbf{A}(t)$ — вектор потенциал волны $\mathbf{A}(t) = A_0 [\mathbf{e} \cdot \exp(-i\omega t) + \text{к. с.}]$. Для

оператора W воспользуемся моделью потенциала нулевого радиуса [2-7] в одно-центровом приближении, т. е. будем пренебрегать интерференцией электронных волн, рассеянных различными примесями. Тогда

$$W = -W_0 \delta(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Расчет вероятностей n -фотонных переходов между валентной зоной v и зоной проводимости c будет проводиться в рамках нестационарной теории рассеяния (см., например, [8]) с оператором эволюции

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) x(t) y(t), \quad (5)$$

где

$$x(t) = T \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t W(\tau) d\tau\right\}, \quad (6)$$

$$y(t) = T \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t x^+(\tau) V(\tau) x(\tau) d\tau\right\}, \quad (7)$$

$$0(\tau) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 \tau\right) 0 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 \tau\right). \quad (8)$$

В выражениях (6), (7) предполагается адиабатическое включение взаимодействий V и W [8]. В [9] показано, что такое включение не зависящего от времени потенциала W автоматически накладывает условие причинности и позволяет избежать детального анализа расходящихся волн, необходимого в стационарной теории рассеяния.

В силу мультипликативности матричных элементов потенциала (4)

$$W_{l_1 \mathbf{k}_1, l_2 \mathbf{k}_2} = -W_0 \varphi_{l_1 \mathbf{k}_1}^*(0) \varphi_{l_2 \mathbf{k}_2}(0) \quad (9)$$

разложение по W для матричных элементов оператора $x(t)$ удается просуммировать точно, тогда как для не слишком большой интенсивности света при вычислении $y(t)$ в случае n -фотонного перехода можно ограничиться n -м порядком по V .

В результате для матричного элемента $U(t)$ получим

$$\langle c \mathbf{k}' | U^{(n)}(t) | v \mathbf{k} \rangle = -\frac{\exp[-it(\bar{\omega}_n + i\varepsilon)]}{\hbar(\omega_c(\mathbf{k}') - \bar{\omega}_n - i\varepsilon)} M_{c \mathbf{k}', v \mathbf{k}}^{(n)}(\bar{\omega}_n, \dots, \bar{\omega}_0), \quad (10)$$

$$\bar{\omega}_n = \omega_v(\mathbf{k}) + n\omega, \quad \omega_l(\mathbf{k}) = \frac{E_l(\mathbf{k})}{\hbar}.$$

Вводя сокращенные обозначения для индексов типа $l_i \mathbf{k}_i = i$, $\omega_{l_i}(\mathbf{k}_i) = \omega_i$ и т. п., запишем выражение для составного матричного элемента в виде

$$M_{c \mathbf{k}', v \mathbf{k}}^{(n)}(\bar{\omega}_n, \dots, \bar{\omega}_0) = \left(-\frac{1}{\hbar}\right)^{n-1} \sum_{1, 2, \dots, 2n} \frac{\tilde{D}_{c \mathbf{k}', 1}(\bar{\omega}_n) V_{1, 2} D_{2, 3}(\bar{\omega}_{n-1}) \dots V_{2n-1, 2n} D_{2n, v \mathbf{k}}(\bar{\omega}_0)}{(\omega_3 - \bar{\omega}_{n-1} - i\varepsilon)(\omega_5 - \bar{\omega}_{n-2} - i\varepsilon) \dots (\omega_{2n-1} - \bar{\omega}_1 - i\varepsilon)}, \quad (11)$$

где

$$\tilde{D}_{1, 2}(\bar{\omega}_n) = \delta_{1, 2} - \frac{z(\bar{\omega}_n) W_{1, 2}}{\hbar(\omega_2 - \bar{\omega}_n - i\varepsilon)}, \quad D_{1, 2}(\bar{\omega}_n) = \delta_{1, 2} - \frac{z(\bar{\omega}_n) W_{1, 2}}{\hbar(\omega_1 - \bar{\omega}_n - i\varepsilon)}, \quad (12)$$

$$z(\bar{\omega}_n) = \left[1 + \frac{1}{\hbar} \sum_{l \mathbf{k}} \frac{W_{l \mathbf{k}, l \mathbf{k}}}{\omega_l(\mathbf{k}) - \bar{\omega}_n - i\varepsilon}\right]^{-1}, \quad (13)$$

$$V_{1, 2} = -\frac{e_0 A_0}{m_0 c} \int d\mathbf{r} \varphi_1^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}) \varphi_2(\mathbf{r}). \quad (14)$$

Величины $D_{1, 2}$ и $\tilde{D}_{1, 2}$ идентичны известным в теории рассеяния волновым функциям стационарных состояний рассеяния в квазиимпульсном представ-

лении, причем $D(\bar{\omega})$ описывает блоховскую падающую на центр и сходящуюся волну, а $\bar{D}^*(\bar{\omega})$ — падающую и сходящуюся волны. Амплитуда же рассеяния электрона на примесном центре пропорциональна величине $a(\bar{\omega}) = W_0 z(\bar{\omega})$.

3. Короткодействующий потенциал W может создавать дискретный уровень в запрещенной зоне либо квазидискретный уровень в разрешенной зоне. В [10] показано, что энергия уровня E_0 в первом случае определяется уравнением

$$1 + V p \sum_{ik} \frac{W_{ik, ik}}{E_I(k) - E_0} = 0. \quad (15)$$

Если же в разрешенной зоне имеется квазистационарное состояние с комплексной энергией E_1 , то существует и действительная величина E_0 (эффективная энергия квазидискретного уровня), лежащая в той же зоне, что и $\text{Re}(E_1)$, и являющаяся решением (15).

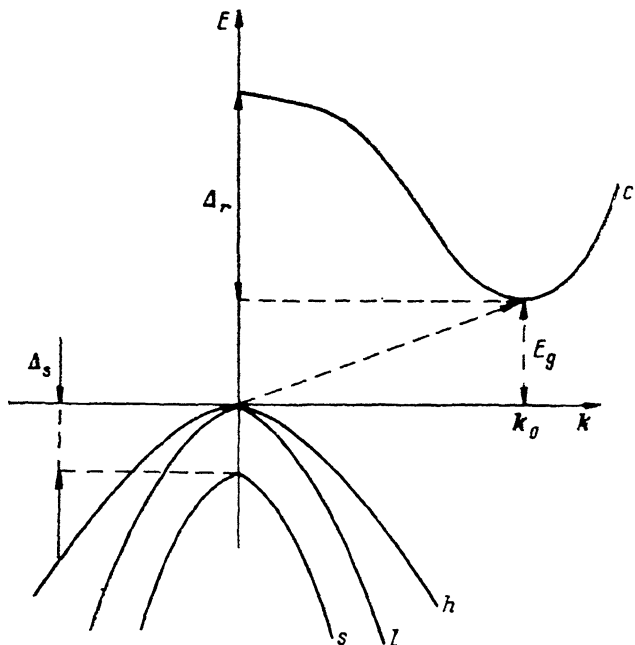


Рис. 1. Зонная структура многодолинного полупроводника.

Используя (15), легко вычислить функцию $a(\bar{\omega})$ (см. [5]), выражая ее, в частности, через E_0 . Расчет $a(\bar{\omega})$ проводился для четырехзонной модели полупроводника, включающей в себя двукратно вырожденные зону проводимости (c), зону тяжелых (h), легких (l) и спин-отщепленных (s) дырок. Энергия отсчитывалась от абсолютного минимума зоны проводимости, имеющей n эквивалентных долин, характеризующихся продольной $m_{||}$ и поперечной m_{\perp} эффективными массами электронов. Дырочные зоны считались изотропными, параболическими:

$$E_v(k) = -E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \quad \text{для } v = h, l, \quad E_s(k) = -E_g - \Delta_s - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_s},$$

где Δ_s — спин-орбитальное расщепление потолка валентной зоны.

В случае, когда параметр $\hbar^2 \bar{\omega}$ попадает в зону c, величина $a(\bar{\omega})$ при наличии дискретного уровня равна

$$a(\bar{\omega}) = -\frac{\pi \hbar^3}{\sqrt{2}} [m_c^{3/2} |E_0|^{1/2} + m_g^{3/2} b(E_g, -|E_0|) + m_s^{3/2} b(E_{gs}, -|E_0|) + i m_c^{3/2} (\hbar \bar{\omega})^{1/2}]^{-1}, \quad (16)$$

а при наличии квазидискретного уровня в зоне c

$$a(\bar{\omega}) = -\frac{\pi \hbar^3}{\sqrt{2}} [m_g^{3/2} b(E_g, E_0) + m_s^{3/2} b(E_{gs}, E_0) + i m_c^{3/2} (\hbar \bar{\omega})^{1/2}]^{-1}, \quad (17)$$

где использованы обозначения

$$b(E_1, E_2) = \sqrt{E_1 + \hbar\tilde{\omega}} - \sqrt{E_1 + E_2}, \quad E_{gs} = E_g + \Delta_s, \quad m_c^{3/2} = \mu m_1 m_1^{1/2}, \quad m_g^{3/2} = m_h^{3/2} + m_l^{3/2}. \quad (18)$$

Выражения для $a(\tilde{\omega})$ в других случаях приведены в *Приложении*.

Из формул (16)–(18), (П.1), (П.2) видно, что если дискретный (квазидискретный) уровень расположен вблизи экстремума разрешенной зоны n_0 , то величины $a(\tilde{\omega})$ для значений $\hbar\tilde{\omega}$, попадающих в зону n_0 , оказываются резонансно большими. В частности, для $n_0 = c$ условия резонанса таковы

$$|E_0|, \quad \hbar\tilde{\omega} \ll E_g.$$

В дальнейшем считаем, что дискретный (квазидискретный) уровень, создаваемый примесным потенциалом, расположен вблизи дна зоны проводимости, т. е. $|E_0| \ll E_g$. Условие же $\hbar\tilde{\omega} \ll E_g$ обеспечивается близостью рассматриваемой области частот к порогу n -фотонного фундаментального поглощения.

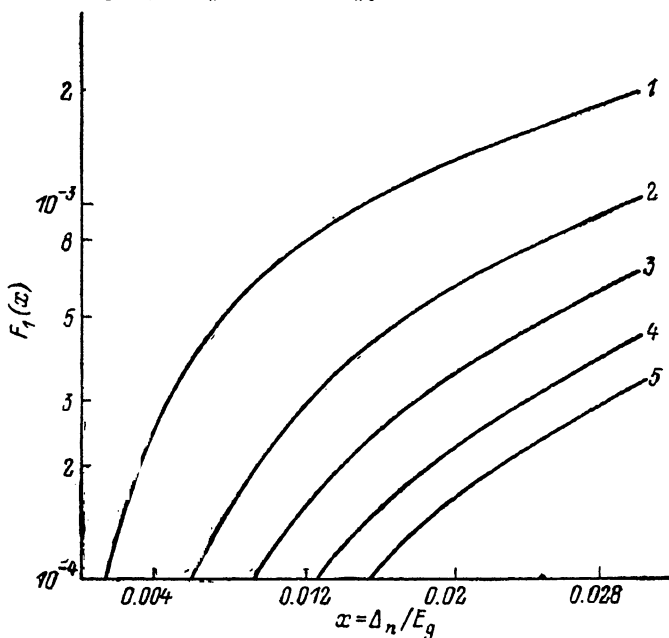


Рис. 2. Зависимость безразмерной функции $F_1(\Delta_n)$ от Δ_n/E_g при $y = |E_0|/E_g$.
 y : 1 — 0, 2 — 0.003, 3 — 0.009, 4 — 0.018, 5 — 0.027. Расчет выполнен для Si.

При рассмотрении переходов между долинами, экстремумы которых расположены в различных точках зоны Бриллюэна, в матричном элементе $M^{(n)}$ должна учитываться недиагональная по квазиимпульсу часть хотя бы одной из функций $D(\tilde{\omega})$ [или $\tilde{D}(\tilde{\omega})$]. Максимальным в условиях n -фотонного междузонного перехода оказывается, разумеется, вклад функции, содержащей резонансную амплитуду рассеяния, т. е. в данном случае $\tilde{D}(\tilde{\omega}_n)$. Возможность пренебречь вкладом недиагональных частей величин $D(\tilde{\omega})$, содержащих нерезонансную амплитуду рассеяния, обеспечивается малостью параметра $x = (\Delta_n/E_g)^{1/2}$, $\Delta_n = n\hbar\omega - E_g$.

Таким образом, при наличии дискретного (или квазидискретного) уровня вблизи экстремума s -зоны матричный элемент перехода в резонансном приближении имеет вид

$$M_{ck', vk}^{(n)}(\tilde{\omega}_n, \dots, \tilde{\omega}_0) = \left(-\frac{1}{\hbar}\right)^n z(\tilde{\omega}_n) \sum_{l_1, \dots, l_n} \frac{W_{ck', l_1 k} V_{l_1 k, l_2 k} \dots V_{l_n k, vk}}{(\omega_{l_1}(k) - \tilde{\omega}_n - i\varepsilon) \dots (\omega_{l_n}(k) - \tilde{\omega}_1 - i\varepsilon)}. \quad (19)$$

В (19) уже использована диагональность по \mathbf{k} матричных элементов оператора импульса электрона. Малость параметра x позволяет сохранить в сумме в пра-

вой части (19) лишь члены, содержащие межзональные матричные элементы $V_{l,k, l,k}$ взаимодействия электрона со светом.

При расчете вероятностей переходов с матричными элементами (19) в рамках упоминавшейся выше четырехзонной схемы предполагалось, что $\Delta_g \ll E_g$, $\Delta_r > E_g$, как это имеет место в Si (Δ_r — расстояние между абсолютным минимумом зоны проводимости и дном этой зоны при $k=0$; рис. 1). В результате для скоростей n -фотонных ($n=1, 2, 3$) переходов в единице объема получаем

$$T_i^{(n)} = \frac{N_0 E_g}{\hbar} \left(\frac{e_0 A_0 P}{\hbar c} \right)^{2n} B^{(n)} F_i(\Delta_n), \quad (20)$$

где значение $i=1$ соответствует дискретному, а $i=2$ квазидискретному уровням, N_0 — концентрация примесей, дающих резонансные состояния, $P = \hbar^2 m_0^{-1} \langle s | d/dx | x \rangle$ — кейновский параметр,

$$B^{(1)} = \Delta_r^{-2}, \quad B^{(2)} = \frac{1 + 2\sigma}{4 (\hbar\omega)^2 (\Delta_r + \hbar\omega)^2}, \quad B^{(3)} = \frac{1}{4 (\hbar\omega)^2 \Delta_r^2 (\Delta_r + 2\hbar\omega)^2}, \quad (21)$$

$$\sigma = e_x e_y + e_x e_x + e_y e_x,$$

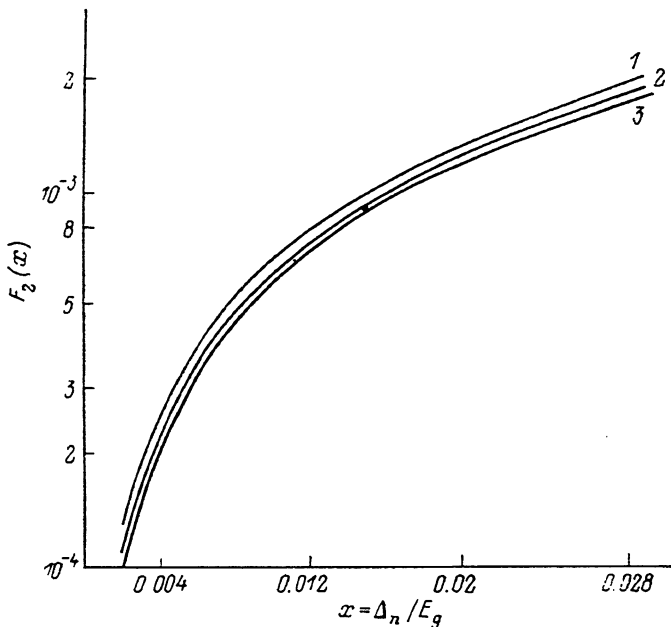


Рис. 3. Зависимость безразмерной функции $F_2(\Delta_n)$ от Δ_n/E_g при $y = E_0/E_g$. y : 1 — 0.003, 2 — 0.018, 3 — 0.03. Расчет выполнен для Si.

e_x, e_y, e_z — проекции вектора поляризации света на кристаллографические оси. Фигурирующие в (20) функции $F_i(\Delta_n)$ даются выражениями

$$F_i(\Delta_n) = \frac{1}{3\gamma^2} (\xi_i^2 - \zeta_i^2)^{-1/2} \sum_{r, l=1}^2 (-1)^l \eta_r (x_{i,l} - \sqrt{\Delta_{nr} + x_{i,l}^2})^2, \quad (22)$$

где использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \gamma^{-2} E_g + 2E, & \xi_2 &= \gamma^{-2} E_g - 2E, & \zeta_1 &= 2E, & \zeta_2 &= 2E_0, \\ \kappa_{i,l}^2 &= \frac{1}{2} [\xi_i + (-1)^{l-1} \sqrt{\xi_i^2 - \zeta_i^2}], & E &= |E_0| + \gamma^{-1} (E_g |E_0|)^{1/2}, \\ \eta_1 &= \frac{1}{2} \left(\frac{m_0}{m_c} \right)^{3/2}, & \eta_2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{m_s}{m_c} \right)^{3/2} \Theta(\Delta_{n2}), & \gamma &= \frac{1}{2} \left(\frac{m_p}{m_c} \right)^{3/2}, \\ m_p^{3/2} &= m_g^{3/2} + m_s^{3/2}, & \Delta_{n1} &= \Delta_n, & \Delta_{n2} &= \Delta_n - \Delta_s, \end{aligned} \quad (23)$$

$\Theta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда. Графики безразмерных функций $F_i(\Delta_n)$ для значений параметров, соответствующих Si, приведены на рис. 2, 3.

4. Таким образом, получены дисперсии вероятностей одно-, двух- и трехфотонных межзонных переходов, сопровождающихся резонансным рассеянием на дискретном или квазидискретном уровне, расположенном вблизи дна зоны проводимости. Легко рассчитать аналогичные процессы и в случае, когда дискретное (квазидискретное) состояние находится у потолка валентной зоны. Представляет интерес сравнить $T_i^{(n)}$ (20) с вероятностями соответствующих переходов при рассеянии на кулоновском примесном потенциале $T_k^{(n)}$. Так, например, для однофотонных переходов в Si n -типа при $\hbar\omega = 1.17$ эВ (излучение неодимового лазера), когда резонансный уровень совпадает с абсолютным экстремумом зоны проводимости (при этом $T_1^{(n)} = T_2^{(n)}$), отношение вероятностей равно

$$\frac{T_k^{(1)}}{T_i^{(1)}} = \frac{4e_0^2 m_c^3}{\hbar^6 \epsilon_0^2 k_0^4} \frac{\eta_1 \Delta_1^2 + \eta_2 \Delta_{12}^2}{\eta_1 \Delta_1 + \eta_2 \Delta_{12}} \approx 10^{-3}, \quad (24)$$

где ϵ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость, k_0 — волновой вектор, соответствующий абсолютному минимуму c -зоны. Похожие оценки получаются для двух- и трехфотонных переходов. Очевидно, что аналогичная ситуация имеет место и для излучательной рекомбинации. Следовательно, предлагаемый в данной работе механизм оптических переходов значительно эффективнее процессов с рассеянием на кулоновском примесном потенциале. В связи с этим можно по-новому интерпретировать хорошо известные экспериментальные данные по люминесценции Si, легированного мелкой водородоподобной примесью [11, 12]. В спектрах люминесценции Si с примесью As или P, кроме линий, отвечающих переходам с участием фононов, наблюдается более высокочастотная линия. Ее появление обычно связывается с наличием кулоновского примесного потенциала. Однако в Si, легированном В, такой линии не наблюдается, хотя и в этом случае примесь водородоподобная. Поэтому естественно предположить, что бесфононная линия обусловлена короткодействующей частью примесного потенциала, которая создает резонансное состояние лишь в первом из этих двух случаев.

Приложение

В случае, когда параметр $\hbar\bar{\omega}$ попадает в валентную зону, величина $a(\bar{\omega})$ равна при наличии дискретного уровня

$$a(\bar{\omega}) = \frac{\pi \hbar^3}{\sqrt{2}} [m_c^{3/2} (\sqrt{-\hbar\bar{\omega}} - \sqrt{-E_0}) + m_g^{3/2} \sqrt{\hbar\nu_0} + m_s^{3/2} (\sqrt{\hbar\nu_{0s}} - \Theta(\nu_{1s}) \sqrt{\hbar\nu_{1s}}) - i (m_g^{3/2} \sqrt{-\hbar\nu_1} + m_s^{3/2} \sqrt{-\hbar\nu_{1s}} \Theta(-\nu_{1s}))]^{-1}, \quad (\text{П. 1})$$

квазидискретного уровня в валентной зоне

$$a(\bar{\omega}) = \frac{\pi \hbar^3}{\sqrt{2}} [m_c^{3/2} (\sqrt{-\hbar\bar{\omega}} - \sqrt{-E_0}) + m_s^{3/2} (\Theta(\nu_{0s}) \sqrt{\hbar\nu_{0s}} - \Theta(\nu_{1s}) \sqrt{\hbar\nu_{1s}}) - i (m_g^{3/2} \sqrt{-\hbar\nu_1} + \Theta(-\nu_{1s}) m_s^{3/2} \sqrt{-\hbar\nu_{1s}})]^{-1}, \quad (\text{П. 2})$$

квазидискретного уровня в зоне проводимости

$$a(\bar{\omega}) = \frac{\pi \hbar^3}{\sqrt{2}} [m_c^{3/2} \sqrt{-\hbar\bar{\omega}} + m_g^{3/2} \sqrt{\hbar\nu_0} + m_s^{3/2} (\sqrt{\hbar\nu_{0s}} - \Theta(\nu_{1s}) \sqrt{\hbar\nu_{1s}}) - i (m_g^{3/2} \sqrt{-\hbar\nu_1} + \Theta(-\nu_{1s}) m_s^{3/2} \sqrt{-\hbar\nu_{1s}})]^{-1}. \quad (\text{П. 3})$$

Если же параметр $\hbar\bar{\omega}$ попадает в зону проводимости, то при наличии квазидискретного уровня в валентной зоне

$$a(\bar{\omega}) = -\frac{\pi \hbar^3}{\sqrt{2}} [m_c^{3/2} \sqrt{-E_0} + m_g^{3/2} \sqrt{\hbar\nu_1} + m_s^{3/2} (\sqrt{\hbar\nu_{1s}} - \Theta(\nu_{0s}) \sqrt{\hbar\nu_{0s}}) + i m_s^{3/2} \sqrt{\hbar\bar{\omega}}]^{-1}. \quad (\text{П. 4})$$

В (П.1)—(П.4) были использованы следующие обозначения:

$$\hbar\nu_0 = E_g + E_0, \quad \hbar\nu_1 = E_g + \hbar\bar{\omega}, \quad \hbar\nu_{is} = \hbar\nu_i + \Delta_s, \quad (i=0, 1),$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Список литературы

- [1] McLean T. P. // *Progr. Semicond.* 1960. V. 5. P. 53—102.
- [2] Hass C. // *Phys. Rev.* 1962. V. 125. N 6. P. 1965—1971.
- [3] Pankove J. I., Aigrain P. // *Phys. Rev.* 1962. V. 126. N 3. P. 956—962.
- [4] Balkanski M., Aziza A., Amzallag E. // *Phys. St. Sol.* 1969. V. 31. N 1. P. 323—330.
- [5] Бонч-Бруевич В. Л. // *Вестн. МГУ. Физика, астрономия.* 1971. Т. 12. В. 5. С. 586—593.
- [6] Перель В. И., Ясневич И. Н. // *ЖЭТФ.* 1982. Т. 82. В. 1. С. 237—245.
- [7] Демков Ю. Н., Островский В. И. *Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике.* Л., 1975. 298 с.
- [8] Ву Т. Ю., Омура Т. *Квантовая теория рассеяния.* М., 1969. 452 с.
- [9] Зубарев Д. Н. *Неравновесная статистическая термодинамика. Приложение I.* М., 1971. 416 с.
- [10] Лифшиц И. М. *Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем.* М., 1987. 552 с.
- [11] Wagner J. // *Phys. Rev. B.* 1984. V. 29. N 4. P. 2002—2009.
- [12] Schmid P. E., Thewalt M., Dumke W. // *Sol. St. Commun.* 1981. V. 38. N 5. P. 1091—1093.

Получена 30.10.1989
Принята к печати 11.04.1990