

УДК 621.315.592
 © 1991

ОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ СИММЕТРИИ ГЛУБОКОГО УРОВНЯ ПО СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СЕЧЕНИЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ

А. А. Пахомов, Э. З. Имамов

Показано, что наличие резкого максимума в спектральной зависимости сечения фотоионизации дефекта с глубоким уровнем при переходах в валентную зону прямозонных полупроводников A^3B^5 является следствием того, что глубокое состояние имеет симметрию A_1 . Обсуждается возможность использования этого факта для идентификации глубоких A_1 -состояний.

Наличие резкого максимума спектральной зависимости сечения фотоионизации при переходах с глубокого уровня симметрии A_1 в валентную зону полупроводников A^3B^5 было предсказано Перелем и Яссиевич в [1]. Там же было предложено использовать наличие этого пика для идентификации A_1 -состояний.¹ Поскольку двухзонная модель работы [1] допускает существование лишь двух типов симметрии глубоких уровней, а для дефекта тетраэдрической симметрии возможно существование уровней пяти типов A_1, A_2, E, T_1, T_2 , то вопрос об идентификации симметрии глубокого состояния по форме полосы поглощения требует дополнительного рассмотрения.

Ниже будет показано, что наличие резкого максимума сечения фотоионизации глубокого состояния действительно характерно лишь для уровней A_1 . При этом для простоты мы будем пренебрегать спин-орбитальным взаимодействием, а также ограничимся рассмотрением прямозонных полупроводников A^3B^5 .

Как показано в [2], волновую функцию локализованного состояния заданной симметрии γ можно представить в виде разложения по зонным волновым функциям, соответствующим точке Γ зоны Бриллюэна $|\Gamma, b, \alpha\rangle$, где индекс b нумерует зоны, а индекс α характеризует их вырождение в точке Γ .

$$|\gamma, m\rangle = \sum_{\mathbf{k}\alpha\mathbf{b}} C_{b\alpha}^{\gamma m}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} |\Gamma, b, \alpha\rangle. \quad (1)$$

Здесь индекс m характеризует вырождение состояния глубокого центра, волновая функция которого преобразуется по неприводимому представлению γ группы T_d . При малых значениях квазиимпульса $|\mathbf{k}| \ll R_0^{-1}$ (R_0 — характерный радиус действия потенциала дефекта) коэффициенты C можно представить в виде [2]

$$C_{b\alpha}^{\gamma m}(\mathbf{k}) = \delta_{\gamma b} \frac{A_{m\alpha}(\mathbf{n}_k)}{E_\gamma - \varepsilon_{b\alpha}(\mathbf{k})}, \quad (2)$$

где \mathbf{n}_k — единичный вектор в направлении \mathbf{k} ; E_γ — энергия глубокого уровня; $\varepsilon_{b\alpha}(\mathbf{k})$ — энергия носителя в подзоне α зоны b ; δ -символ в (2) отражает тот факт, что в силу тетраэдрической симметрии потенциала дефекта в разложение (1) вносят вклад лишь те функции $|\Gamma, b, \alpha\rangle$, симмет-

¹ Состояния A_1 были названы в [1] l -состояниями.

для которых совпадает с симметрией волновой функции локализованного состояния (так, в волновую функцию A_1 -состояния вносят вклад лишь волновые функции зон Γ_1 , в волновую функцию T_2 -состояния — лишь волновые функции зон Γ_{15} и т. д.). Ниже при описании энергетического спектра зон в окрестности Γ -точки мы (для простоты) ограничимся сферически-симметричным приближением эффективной массы $\epsilon_{ba}(\mathbf{k}) \approx E_b + \hbar^2 k^2 / 2m_{ba}$, где E_b — энергия зоны в точке Γ . В этом приближении вклад каждого из слагаемых вида (2) в сечение фотоионизации дефекта с вылетом дырки в подзону γ валентной зоны с точностью до весового коэффициента имеет вид

$$\sigma_{ba, \nu\gamma}^i(\epsilon) \sim \epsilon^\nu / (E_{\gamma\nu} + \epsilon) [E_{\gamma b} + (m_{\nu\gamma} / m_{ba}) \epsilon]^2. \quad (3)$$

Здесь $E_{\gamma b} = |E_\gamma - E_b|$; $\epsilon = \hbar\omega - E_{\gamma\nu}$ — надпороговая энергия фотона; индекс ν означает валентную зону; $\nu=1/2$ для разрешенных переходов и $\nu=3/2$ для запрещенных.

Выясним теперь, какая энергия ϵ_m отвечает максимуму спектральной зависимости сечения фотоионизации. Условие максимума выражения (3) имеет вид

$$(\nu - 3)x^2 + [\beta(\nu - 1) + \nu - 2]x + \beta\nu = 0, \quad (4)$$

где введены безразмерные единицы

$$x \equiv \epsilon_m / E_{\gamma\nu}, \quad \beta \equiv (E_{\gamma b} / E_{\gamma\nu}) (m_{ba} / m_{\nu\gamma}). \quad (5)$$

Переходы с глубоких уровней симметрии A_2 , E , T_1 соответствуют случаю $\beta \gg 1$. Это связано с тем, что ближайшие зоны такой симметрии расположены в полупроводниках A^3B^5 на расстоянии 7–10 эВ от глубокого уровня [3], так что $E_{\gamma b} \gg E_{\gamma\nu}$. При переходах с E -уровня ($\nu=1/2$) надпороговая энергия фотона, отвечающая максимуму, равна $\epsilon_m \simeq E_{\gamma\nu}$. Сечения фотоионизации глубоких уровней A_2 и T_1 при $\beta \gg 1$ вообще не имеют максимума. Таким образом, сечения фотоионизации глубоких уровней A_2 , E , T_1 не могут иметь резкого максимума вблизи края поглощения.

Глубокие уровни A_1 и T_2 соответствуют случаю $\beta \ll 1$, поскольку эффективная масса подзоны тяжелых дырок m_h , как правило, во много раз больше эффективной массы электронов m_e и легких дырок m_l . При этом

$$\epsilon_m = \frac{\beta\nu}{2-\nu} E_{\gamma\nu} \quad \text{или} \quad \epsilon_m = \begin{cases} \frac{m_e}{3m_h} (\epsilon_g - E_{\gamma\nu}) & \text{для } A_1\text{-уровня,} \\ \frac{3m_l}{m_h} E_{\gamma\nu} & \text{для } T_2\text{-уровня,} \end{cases} \quad (6)$$

где ϵ_g — ширина запрещенной зоны, $E_{\gamma\nu}$ — разность энергий уровня и вершины валентной зоны. Таким образом, надпороговая энергия фотона, отвечающая максимуму сечения фотоионизации A_1 -состояния, значительно меньше соответствующей энергии для T_2 -состояния. Исключение составляет лишь узкая область энергий вблизи вершины валентной зоны $E_{\gamma\nu} < (m_e / 9m_l) \epsilon_g$.

Используем эти рассуждения для определения симметрии волновой функции уровня $EL2$ в GaAs. Подставив в (6) значения энергии уровня ($E_\nu = 0.79$ эВ) и эффективных масс, получим $\epsilon_m(A_1) = 0.03$, $\epsilon_m(T_2) = 0.37$ эВ. Поскольку максимум сечения фотоионизации соответствует энергии кванта $\hbar\omega_m = 0.96$ эВ [4], эти результаты свидетельствуют в пользу того, что рассматриваемый уровень имеет симметрию A_1 . В самом деле, при сравнении расчетного и экспериментального значений $\hbar\omega_m$ необходимо учесть взаимодействие локализованного на центре носителя с колебаниями дефекта. Это взаимодействие приводит к размытию полосы поглощения и сдвигу ее максимума на величину, приближенно равную энергии Франка—

Кондона ϵ_{FC} [5]. Таким образом, для энергии фотона, соответствующей максимуму примесного поглощения, приближенно имеем

$$\hbar\omega_m \approx E_{\gamma\nu} + \epsilon_m + \epsilon_{FC}. \quad (7)$$

Подставив в эту формулу значение $\epsilon_m(A_1)$ и величину энергии Франка—Кондона для уровня $EL2$ $\epsilon_{FC}=0.12 \pm 0.02$ эВ [6, 7], имеем $\hbar\omega_m \approx 0.95$ эВ, что близко к наблюдаемому значению [4, 6]. В то же время $\hbar\omega_m(\Gamma_2) \approx 1.28$ эВ.

Резюмируя, отметим, что наличие отчетливо выраженного максимума сечения фотоионизации глубокого уровня, лежащего близко к середине или в верхней половине запрещенной зоны, при переходах в валентную зону, однозначно свидетельствует о том, что этот уровень имеет симметрию A_1 . Для уровней, приближенных к валентной зоне, вопрос определения симметрии нужно рассматривать аналогично обсужденному выше случаю уровня $EL2$ (т. е. вычисляя $\epsilon_m(A_1)$, $\epsilon_m(T_2)$ и учитывая электрон-фононное взаимодействие). Отметим также, что результаты данной работы справедливы и в случае произвольного спин-орбитального расщепления.

Список литературы

- [1] Перель В. И., Ясневич И. Н. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 1. С. 237—245.
- [2] Имамов Э. З., Пахомов А. А., Ясневич И. Н. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. № 4 (10). С. 1410—1418.
- [3] Цидильковский И. М. Зонная структура полупроводников. М., 1978. 340 с.
- [4] Silverberg P., Samuelson P., Omling P. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 20. P. 1289—1291.
- [5] Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М., 1986. 304 с.
- [6] Chantre A., Vincent G., Bois D. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. N 10. P. 5335—5359.
- [7] Yu P. W. // Sol. St. Comm. 1982. V. 43. N 12. P. 953—956.

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

Поступило в Редакцию
14 сентября 1990 г.