

**ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ,
СВЯЗАННОЙ С БИНАРНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

А.Н. Георгобиани, А.Н. Грузинцев, А.В. Заяц, И.М. Тигиняну

Исследована излучательная рекомбинация носителей на комплексах дефектов в полупроводниках. Установлена связь между микроскопическими параметрами комплекса (расстояние между дефектами, их энергетические положения и др.) и характеристиками его люминесценции.

Взаимодействие точечных (собственных или примесных) дефектов в полупроводниковых соединениях приводит к тому, что при концентрациях $N \geq 10^{17} \text{ см}^{-3}$ значительная их часть располагается в ближайших узлах кристаллической решетки /1/. Орбита электрона, локализованного на комплексе двух близко расположенных дефектов будет охватывать оба дефекта. В этом случае основным взаимодействием, определяющим положение энергетических уровней бинарного комплекса в запрещенной зоне полупроводника, является обменное взаимодействие /2/. Для описания такого комплекса уже нельзя пользоваться приближением донорно-акцепторных пар /1, 3/, в котором смещение уровней происходит за счет кулоновского взаимодействия.

В /4/ получены соотношения для энергетического положения уровней комплекса близко расположенных дефектов в предположении о короткодействии их потенциалов: $(\kappa - \kappa_1)(\kappa - \kappa_2) = e^{-2\kappa R}/R^2$, где R — расстояние между дефектами с энергией связи E_i ; $\kappa_1 = \sqrt{-2m_1^*E_i/\hbar}$; $\kappa = \sqrt{-2m_0E_0/\hbar}$.

В данной работе анализируется теоретическая форма кривых люминесценции бинарных комплексов, исследуется анизотропия, поляризационные и температурные характеристики оптических переходов, связанных с уровнями комплексов.

Использование в качестве модельного потенциала трехмерной δ -функции с определенным множителем (A_1 или A_2 — для разных дефектов) представляется естественным в случае центров, имеющих глубокие уровни в полупроводниках /5/ и дает хорошее совпадение с экспериментальными результатами по фотоионизации дефектов /5, 6/.

Уравнение Шредингера для электронной волновой функции бинарного комплекса в адиабатическом приближении имеет вид:

$$-\left(\hbar^2/2m\right)\Delta\psi - [A_1\delta(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) + A_2\delta(\mathbf{r}-\mathbf{R})f(\mathbf{r}-\mathbf{R})]\psi = E\psi. \quad (1)$$

Коэффициенты A_1 и A_2 перед δ -функциями можно определить, зная энергии связи E_1 и E_2 основного состояния электрона на изолированных дефектах, формирующих комплекс: $A_i = 4\pi(\hbar^2/2m_i)^{3/2}(-E_i)^{-1/2}$. Оператор $f(\mathbf{r}) = 1 + r \text{grad}$ введен для того, чтобы от сингулярной части волновой функции вида Cr^{-1} (r — расстояние от электрона до остова) оставить лишь постоянную конечную величину C /7/.

Решение уравнения (1), выраженное через функцию Грина $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и решение однородного уравнения $\psi_0(\mathbf{r})$, имеет вид $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + A_1 G_E(\mathbf{r}, 0)[f\psi]_0 + A_2 G_E(\mathbf{r}, \mathbf{R})[f\psi]_R$. Выражения $[f\psi]_0$ и $[f\psi]_R$ означают, что после действия операторов $f(\mathbf{r})$ и $f(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ на функцию следует перейти к пределам $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow R$ соответственно. Применяя операторы $f(\mathbf{r})$ и $f(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ и переходя к пределам $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow R$, можно выразить $[f\psi]_0$ и $[f\psi]_R$ через $[f\psi_0]_0$ и $[f\psi_0]_R$.

Учитывая аксиальную (в силу геометрии комплекса) симметрию задачи, будем искать функцию Грина и решение однородного уравнения в виде разложения $\sum_m \int_{-\infty}^{+\infty} dE' C_{mE'}(z, z') e^{im\varphi} J_m(\rho\sqrt{2mE'/\hbar})$, где z, ρ, φ — цилиндрические координаты (ось z направлена вдоль оси комплекса); J_m — функция Бесселя; $C_{mE'}(z, z')$ функции, вид которых определяется из краевых условий и ортонормированности волновых функций.

Таким образом можно определить волновые функции связанного состояния электрона на комплексе при $E = E_0 < 0$:

$$\psi_i = C_i [A_1 \exp(-|z|\sqrt{-2m_0 E_0/3\hbar^2}) + A_2 K \exp(-|z - R|\sqrt{-2m_0 E_0/3\hbar^2})] K_0(\rho\sqrt{-4m_0 E_0/3\hbar^2}).$$

Для излучения света, поляризованного перпендикулярно оси комплекса, матричный элемент дипольного перехода $(\rho \cos \varphi)_{ij}$ отличен от нуля для возбужденных состояний $E > 0$, $\psi_{j\perp} = C_j \cos(z\sqrt{2m^*E/3\hbar^2}) \times \times e^{\pm i\varphi} J_{\pm 1}(\rho\sqrt{4m^*E/3\hbar^2})$, а для поляризации вдоль оси основной вклад в $(z)_{ij}$ дает

$$\psi_{j\parallel} = (C_j/\gamma(E,R)) [J_0(\rho\sqrt{4m^*E/3\hbar^2}) \cos(z\sqrt{2m^*E/3\hbar^2}) + N_0(\rho\sqrt{4m^*E/3\hbar^2}) (K_1 \cos(z\sqrt{2m^*E/3\hbar^2}) + K_2 \cos(|z - R|\sqrt{2m^*E/3\hbar^2}))].$$

Вводя обозначение $x = R\sqrt{2m^*E/3\hbar^2}$, имеем $\gamma^2 = 1 + (64\pi^2 x^2/3R^2)[(\kappa_1^{-2} - \kappa_2^{-2})(1 + \cos^2 x) - 4\cos x/\kappa_1 \kappa_2]$.

Зная волновые функции возбужденного и основного состояний электрона, можно вычислить матричные элементы переходов. В результате интегрирования получаем

$$|\langle \psi_i | r | \psi_j \rangle|^2 \propto (-2m_0 E_0/3\hbar^2)^{-3/2} E_0^4 (m^*E - m_0 E_0)^{-4} k_{\perp,\parallel}^2.$$

Здесь k_{\perp} относится к оптическим переходам с излучением света с перпендикулярной, а k_{\parallel} с параллельной оси комплекса поляризацией. С учетом того, что линия люминесценции достаточно узка (по крайней мере $\Delta \hbar\omega < 3$ эВ) имеем: $k_{\perp} = E(A_1 + A_2 K)/(m^*E - m_0 E_0)$, $k_{\parallel} = (2\sqrt{2}/\gamma) \times A_2$. Считаем, что интенсивность накачки достаточна для возбуждения всех комплексов N и после возбуждения электрон успевает термализоваться в зоне проводимости прежде, чем рекомбинирует на комплексе. Тогда форма полосы люминесценции имеет вид $\Phi(\omega) \propto \omega^4 (k_B T)^{-3/2} E^{-7/2} e^{-E/k_B T} k_{\perp,\parallel}^2$, где $E = E_0 + \hbar\omega$.

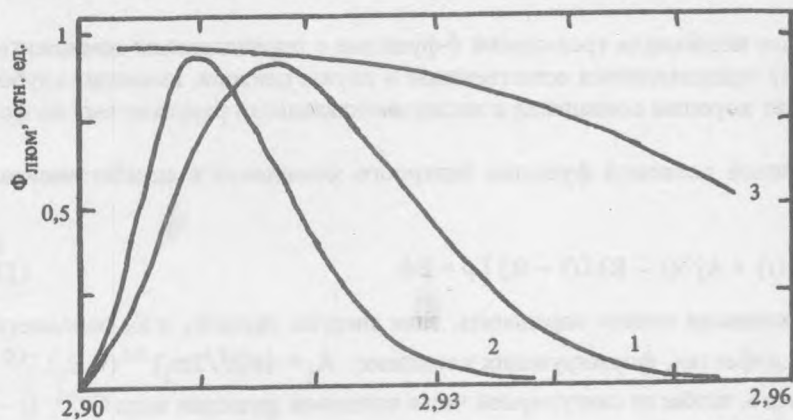
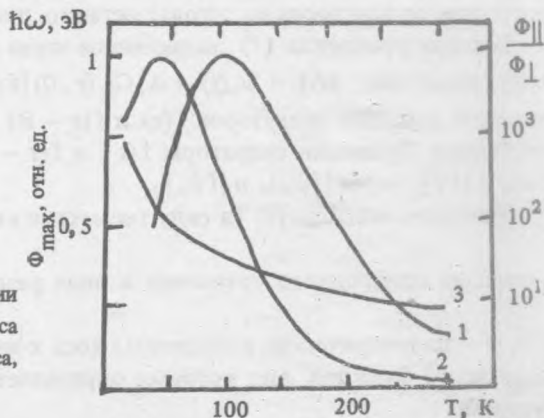


Рис. 1. Форма люминесценции, связанная с чисто электронным переходом: для поляризации перпендикулярной (1) и параллельной (2) оси комплекса; (3) — степень спонтанной поляризации, $T = 80$ К. Параметры комплекса: $E_1 = -0,9$ эВ, $E_2 = -2,55$ эВ, $R = 2,23$ Å.

Рис. 2. Температурные зависимости интенсивностей люминесценции для перпендикулярной (1) и параллельной (2) оси комплекса поляризации света; (3) — $\Phi_{\parallel}/\Phi_{\perp}$ при тех же параметрах комплекса, что и на рис. 1.



На рис. 1 приведены кривые, полученные в результате расчета для некоторых часто встречающихся параметров комплекса и показана степень стонтанной поляризации излучения относительно оси комплекса: $P(\omega) = [\Phi_{\parallel}(\omega) - \Phi_{\perp}(\omega)] / [\Phi_{\parallel}(\omega) + \Phi_{\perp}(\omega)]$. Линия излучения с поляризацией перпендикулярной оси комплекса имеет большую полуширину и сдвинута относительно линии параллельной поляризации в коротковолновую сторону на энергию порядка нескольких $k_B T$. Отношение интенсивностей люминесценции с разной поляризацией в максимумах $\Phi_{\parallel}(\omega_{\max}^{\parallel}) / \Phi_{\perp}(\omega_{\max}^{\perp})$ колеблется в пределах от 10 до 50 для различных параметров комплекса. В этом коренное отличие люминесценции, связанной с комплексами дефектов, от случая изолированного дефекта, для которого все поляризации равноправны $\Phi_{\parallel} / \Phi_{\perp} = 1$, и от случая донорно-акцепторной пары, в которой свет поляризован вдоль оси: $\Phi_{\parallel} / \Phi_{\perp} \rightarrow \infty$.

На рис. 2 показано изменение с температурой абсолютных интенсивностей излучений разных поляризаций. Видно, что с ростом температуры падают интенсивности обеих поляризаций, причем параллельной несколько быстрее. Кроме этого положение максимумов линий тоже зависит от T . При низких температурах максимумы для обеих поляризаций совпадают, а с увеличением T движутся (без учета уменьшения ширины запрещенной зоны) в более коротковолновую сторону: Φ_{\perp} по линейному закону, для Φ_{\parallel} — менее быстро. Следует заметить, что кривые на рис. 2 справедливы только для тех уровней легирования и температур, для которых можно пользоваться бoльцмановским распределением электронов в зоне проводимости.

Полученные соотношения между оптическими характеристиками комплекса и его микроскопическими параметрами (расстояние между дефектами, энергетическое положение уровня в запрещенной зоне и др.) представляются перспективными для идентификации центров люминесценции в полупроводниках.

ЛИТЕРАТУРА

1. Williams F. E. Phys. Stat. Sol. (a), 25, 493 (1968).
2. Баграев Н. Т., Вахнин В. С. ЖЭТФ, 86, 200 (1984).
3. Мастеров В. Ф. ФТП, 18, 3 (1984).
4. Georgobiani A. N. et al. Phys. Stat. Sol. (a), 38, 77 (1976).
5. Георгобияни А. Н., Грузинцев А. Н., Заяц А. В. Препринт ФИАН № 303, М., 1986.
6. Amato M. A., Ridley B. K. J. Phys. C, 13, 2027 (1980).
7. Виноградов В. С. ФТТ, 13, 3266 (1971).

Поступила в редакцию 14 августа 1987 г.